

STREUUNG SCHNELLER GELADENER
TEILCHEN UM $\langle 100 \rangle$
IN KUBISCHEN GITTERSTRUKTUREN

Diffusionsanalyse der azimuthalen Verteilung
und der Querenergieverbreiterung

Siegfried SCHMID

1974



Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41551921_0106

STREUUNG SCHNELLER GELADENER TEILCHEN UM $\langle 100 \rangle$

IN KUBISCHEN GITTERSTRUKTUREN

Diffusionsanalyse der azimutalen Verteilung
und der Querenergieverbreiterung

INAUGURAL-DISSERTATION

zur Erlangung des Doktorgrades

der Fakultät für Physik

der Ludwig-Maximilians-Universität München

vorgelegt von

Diplom-Physiker Siegfried Schmid

aus Nürnberg

München 1974



1. Berichterstatter Prof. Dr. R. Sizmann
2. Berichterstatter Prof. Dr. Č. Zupančič

Tag der mündlichen Prüfung 26. Juli 1974

Inhaltsverzeichnis

	Seite
1. Einleitung	1
1.1 Transmissionsexperimente	
1.2 Problemstellung	2
2. Bestrahlungsanlage	4
3. Präparation der Targets	6
3.1 Mechanische Bearbeitung	
3.2 Chemische Behandlung	7
3.3 Untersuchung der endbearbeiteten Proben	8
3.3.1 Dickenmessung	
3.3.2 Gütebestimmung	9
4. Experimentelle Ergebnisse	12
4.1 Behandlung der experimentellen Daten	
4.2 Streufiguren	13
5. Theoretische Grundlagen	15
5.1 Kontinuumsnäherung	
5.1.1 Axiale Effekte	
5.1.1.1 Atomreihenpotential	
5.1.1.2 Verteilung im Azimutwinkel	18
5.1.1.3 Querenergieverteilung	21
5.1.2 Ebeneneffekte	23
5.1.2.1 Schattenbildung	
5.1.2.2 Führungseffekt	25
5.2 Abweichungen von der Kontinuumsnäherung	28
5.2.1 Vielfachstreuung	
5.2.2 Diffusionsgleichung für die Querenergie	30

6.	Modellrechnung für die Azimutverteilung	33
6.1	Simulation der Streuverteilung	
6.1.1	Grundannahmen des Programms	
6.1.2	Programmstruktur	35
6.1.2.1	Eingabedaten	
6.1.2.2	Streueinheit	36
6.1.2.3	Ergebnisse	37
6.1.2.3.1	Winkelverteilung	
6.1.2.3.2	Diffusionskoeffizienten	38
6.1.2.3.3	Leckrate	40
6.1.3	Programmtests	
6.2	Diffusionsgleichung für die Azimutverteilung	41
7.	Vergleich der Messkurven mit dem Modell	45
7.1	Querenergieabhängigkeit	
7.2	Ebenenstruktur	46
8.	Diskussion und Ergebnisse	47
9.	Zusammenfassung	51

Literaturverzeichnis

Anhang: Computerprogramm

1. Einleitung

1.1 Transmissionsexperimente

Die Gitterperiodizität einkristalliner Proben beeinflusst die Bahnen schneller geladener Teilchen bei ihrem Durchgang in charakteristischer Weise: es treten ausgeprägte Anisotropieeffekte in Intensität und Energieverlust der gestreuten Projektile auf.

Wenn ein kollimierter Strahl unter einem kleinen Winkel zu einer hochsymmetrischen Kristallachse einfällt, dann läßt sich die Streuverteilung als Wirkung eines näherungsweise zylinderförmigen Atomreihenpotentials (Kontinuumspotential /1/) beschreiben. In Transmission durch dünne Targets erhält man so eine markante ringförmige Verteilung - konzentrisch zur Symmetrierichtung /2,3/.

Im Kontinuumsmodell bleibt bei einer Wechselwirkung mit der Atomreihe die Energie des Teilchens quer zur Reihenrichtung und somit der ursprüngliche Winkel ψ zur Achse - gemessen im praktisch potentialfreien Gebiet zwischen den Atomreihen - erhalten: die Teilchen werden auf einem Kegel um die Richtung der Atomreihe geführt (siehe Abb. 1). Mit zunehmender Eindringtiefe wird die schmale Eintrittsverteilung zu einem breiten Ring verschmiert, dessen mittlerer Radius vom Einfallswinkel bestimmt wird.

Die mittlere freie Weglänge für den azimuthalen (φ -) Verteilungsprozess ist empfindlich vom Winkel zur Atomreihe abhängig. Mit wachsender Querergergie nimmt die Streuwirkung, der mittlere azimuthale Drehwinkel von der Einschubrichtung um die Reihe, stark ab. Das bedeutet, daß bei einer vorgegebenen Kristalldicke die Teilchen innerhalb eines kritischen Einschubwinkels ψ_{kr} gleichmäßig auf dem Ring verteilt sind, während sie für größere Einschubwinkel um den Eintrittsort konzen-

triert bleiben. Die Gültigkeitsgrenze des Kontinuumsmodells verschiebt sich mit wachsendem ψ zu größeren Stoßparametern mit der Atomreihe, weil dann querenergieändernde Streuprozesse um große Winkel wegen der tatsächlich diskreten Struktur der Atomreihe wahrscheinlicher werden. Das führt zusammen mit der Wirkung der atomaren Vielfachstreuung, die aus der thermischen Bewegung der Gitterbausteine resultiert, zu einer Verbreiterung des Rings und Überwiegen der Vorwärtsstreuung.

Das Auftreten der Blockierungslinien um niedrigindizierte Gitterebenen macht deutlich, daß auch diese einen Einfluß auf die Azimutverteilung haben können.

Die Untersuchung der die Streuprofile prägenden Größen läßt Aufschlüsse über Details der anisotropen Bewegung erwarten. Wenn die Winkeldivergenz des Eintrittsstrahls merklich kleiner als die für die Gitterführung maßgeblichen kritischen Winkel ist, können die Teilchen in definierte Querenergie- und Winkelregionen plaziert werden. Das macht es experimentell möglich, bestimmte Bereiche des Atomreihenpotentials abzutasten. Bei dünnen Targets bleibt außerdem der Einfluß der Vielfachstreuung gering, so daß er von der Wirkung des gemittelten Potentials getrennt werden kann und so die Querenergieabhängigkeit beider sichtbar wird.

1.2 Problemstellung

Zur quantitativen Analyse des oben angeführten Streuverhaltens werden Transmissionsexperimente mit 4-MeV-Alpha-Teilchen an 1-3 μm dicken Magnesiumoxid-Einkristallen durchgeführt. Die Intensitätsverteilungen der durchgehenden Teilchen werden auf Photoplaten aufgezeichnet. Die Form der Streuverteilungen wird in Abhängigkeit von Kristalldicke und Einfallswinkel gegenüber der $\langle 100 \rangle$ -Gitterrichtung, vor allem im Übergangsbereich $\psi_{kr} < \psi < 2\psi_{kr}$, untersucht.

Die Messungen sollen mit berechneten Modellverteilungen verglichen werden. Das Modell basiert auf den Vorstellungen der Kontinuumsnäherung und berücksichtigt die Gitterperiodizität

in der Querebene. Das führt zu einem anisotropen Diffusionsmechanismus für die Entwicklung der Azimutwinkelverteilungen.

Die radiale Verbreiterung des ringförmigen Streuprofiles läßt Aussagen über Stärke und Winkelabhängigkeit der Vielfachstreuung zu. Diese Ergebnisse sollen mit Überlegungen der Dechanneling-Theorie verglichen werden.

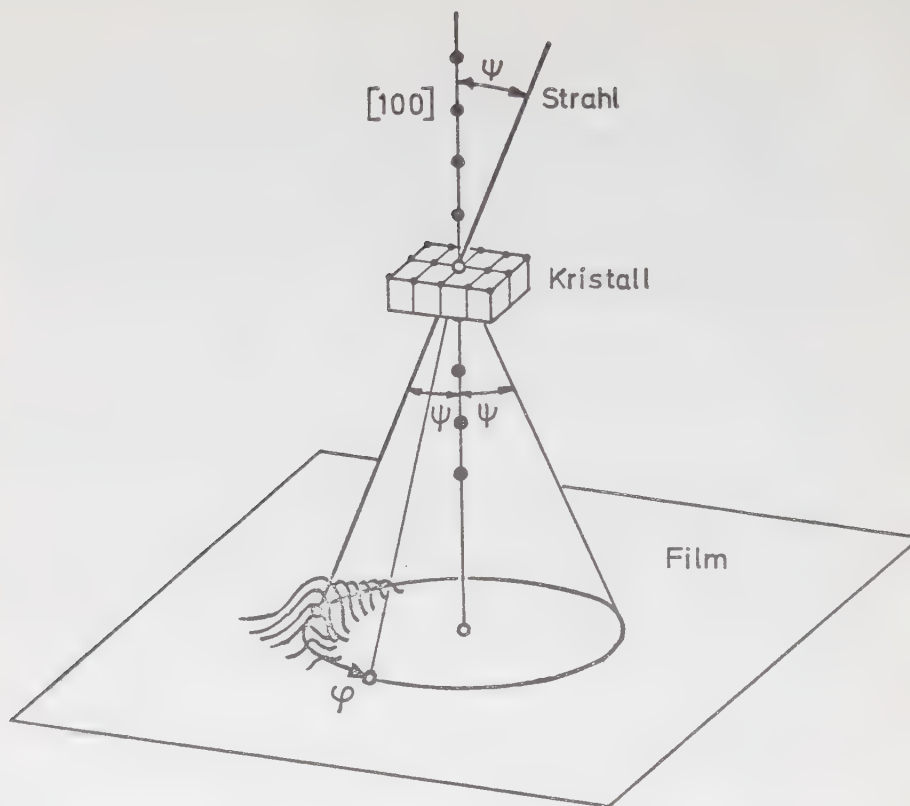


Abb.1 Prinzip der Messanordnung

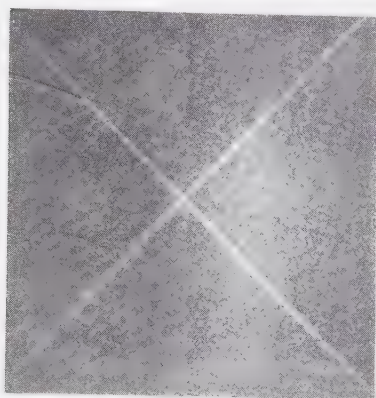


Abb. 2 Kanalogramm für einen etwa 1,5 μm -dicken Magnesiumoxid-Einkristall

2. Bestrahlungsanlage

Die Transmissionsexperimente erfordern einen gutkollimierten ($\approx 0,02^\circ$) Teilchenstrahl, die Möglichkeit, den dünnen Einkristall definiert ($\approx 0,05^\circ$) gegenüber dem einfallenden Strahl zu orientieren und die Streuprofile mit entsprechender Auflösung ($\approx 0,05^\circ$) zu registrieren.

Die Alphateilchen werden von einem offenen Po-210-Präparat mit einer Zerfallsenergie von $5,4$ MeV emittiert. Die Aktivität der Quelle beträgt 300 mCi auf einer Fläche von etwa 3 mm $\varnothing$. Die radioaktive Quelle befindet sich in einer Metallkapsel, die gegenüber dem Strahlrohr mit einer $\approx 2\mu\text{m}$ dicken Glimmerfolie abgedichtet ist. Der Abstand zwischen Präparat und Target ist etwa 3 m.

Der Teilchenstrahl wird durch zwei Quadrupolmagnete und ein System von Blenden kollimiert. Die Divergenz des auf die Kristallprobe fallenden Strahls läßt sich mit einer Irisblende zwischen $\pm 0,02^\circ$ und $\pm 0,1^\circ$ variieren. Dadurch hat man zum Justieren der Probe eine höhere Intensität zur Verfügung.

Am Ort des Kristalls haben die Teilchen eine mittlere Energie von $4,3$ MeV mit einer Abweichung von $\pm 5\%$. Das Winkelprofil ist in guter Näherung kastenförmig. Als Intensität ergibt sich bei einer Strahlöffnung von $\pm 0,1^\circ$, 600 Teilchen/s.mm².

Die Targetkammer enthält ein zweiachsiges Goniometer und einen Halbleiterdetektor mit dem der Teilchenfluß kontrolliert werden kann.

Die eine Achse des Goniometers realisiert die Änderung des Azimutwinkels (φ) und fällt mit der Oberflächennormale des Kristalls - gleichzeitig die $\langle 100 \rangle$ Richtung - zusammen. Die Polarachse (ψ -Achse) steht senkrecht darauf. Abb. 1 zeigt schematisch die Lage von Strahl und Kristall in einem typischen Fall.

Der Winkel zwischen Gitterrichtung und Strahl läßt sich auf $0,05^\circ$ reproduzierbar einstellen.

Da die winzigen ($\approx 1 \text{ mm}^2$) Targets nicht definiert auf den Träger aufgebracht werden können, ist es nötig, im ersten Schritt der Justierung die $\langle 100 \rangle$ -Richtung mit der Azimutachse zur Deckung zu bringen. Zu diesem Zweck ist ein kleines dreiachsiges Röntzengoniometer im Zentrum des Targetgoniometers montiert.

Die Streuverteilungen der transmittierten Teilchen werden mit einer einfachen Bildverstärkerkamera /4/ aufgenommen. Die Teilchen fallen auf einen ZnS(Ag) -Leuchtschirm. Dicht dahinter liegt ein Planfilm (Ilford HP4), der die Lichtblitze registriert.

Der Abstand zwischen Target und Film beträgt 550 mm, d.h. der Länge 1 mm auf dem Film entspricht ein Winkel von $\approx 0,1^\circ$. Eine Messung liefert bei einer Belichtungszeit von etwa 15 h eine Übersicht des Streuprofiles in einem Winkelbereich von $\approx 2^\circ$ um die Gitterrichtung.

3. Präparation der Targets

Das hier angewandte Verfahren geht von massiven MgO-Einkristallscheiben aus, die auf mechanischem und chemischem Wege abgetragen werden.

Das Ausgangsmaterial hat die Form von quadratischen Platten mit einer Kantenlänge von 10 mm und einer Dicke von 1 mm. Die Platten sind von einem Rohling abgespalten, der aus der Bogenschmelze gezogen wurde. Nach dem Spalten wurden die Stücke spannungsfrei gegläht. Die Oberfläche ist eine kristallographische {100} -Ebene. Als chemische Reinheit wird 99,95% angegeben, wobei (typische Werte) CaO mit $\approx 0,1$ Gewichts-%, SiO_2 mit 0,05 Gewichts-% und Fe_2O_3 mit 0,03 Gewichts-% den weitaus größten Anteil an Verunreinigung ausmachen.

Mit Hilfe eines Röntgendoppelkristallspektrometers /5/ konnte die Mosaikstruktur bestimmt werden. Die mittlere Winkelverkipfung der Kristallblöcke gegeneinander ist demnach 1-2 Bogenminuten.

3.1. Mechanische Bearbeitung

Die quadratischen Stücke werden zuerst sorgfältig an Ecken und Kanten gerundet. Dann klebt man sie mit Kanadabalsam oder Bienenwachs auf plane, völlig kratzerfreie Kupfer- oder Messingträger, die auf eine Präzisions-Poliermaschine /6/ gespannt werden.

Die eine Seite der Probe wird nun mit Siliziumkarbid oder Kunstkorund abnehmender Gradierung (Korngröße von $25\text{ }\mu\text{m}$ - $10\text{ }\mu\text{m}$) auf einer Schleifscheibe aus weichem Material (Lot oder Zinn) bearbeitet. Bei dem Vorgang drehen sich Scheibe und Kristall mit verschiedenen, jeweils einstellbaren Geschwindigkeiten gegeneinander. Der Auflagedruck ist mit einer Feder regulierbar und schwankt zwischen 100 p/cm^2 und 1000 p/cm^2 je nach gewünschter Abtragsrate ($1\text{-}5\text{ }\mu\text{m/h}$ bis $100\text{ }\mu\text{m/h}$) und Glätte der Oberfläche.

Es folgt das Polieren auf feinem Tuch mit Zirkon- und Ceroxid (Korngröße $< 5 \mu\text{m}$) oder Aluminiumoxid ($2-0,5 \mu\text{m}$) unter hoher Belastung (bis 2 kp/cm^2) durch ein zusätzliches Auflagegewicht. Durch Zugabe einiger Tropfen Ammoniaklösung oder einer Spur Orthophosphorsäure kann man den Poliervorgang beschleunigen und eventuell ein besseres Ergebnis erzielen.

Die Oberfläche der Probe wird am Ende spiegelnd und bis zu 60-facher Vergrößerung kratzerfrei. Zurück bleibt eine für jedes Stück unterschiedliche Anzahl kleiner Gruben, einige $10^3/\text{cm}^2$. Nach dem Ablösen von der Unterlage wird der Kristall mit einem weichen Pinsel in Trichloräthylen und Aqua dest. gereinigt und gewendet. Dann wiederholt sich dieselbe Prozedur für die andere Seite.

Bis zu etwa $50 \mu\text{m}$ kann die Dicke der Probe mit der Mikrometerschraube gemessen werden. Später geschieht das mit einem Mikroskop, das über eine Teilung am Höhenfeintrieb verfügt, durch Scharfstellen auf untere und obere Fläche des Plättchens. Im letzten Stadium der Behandlung nehmen die Proben eine leicht konvexe Form an und verkleinern sich durch Abbrechen vom Rand her. Um die Scheibchen vor der völligen Zerstörung zu schützen, muß die mechanische Behandlung in der Regel bei einer Dicke zwischen 10 und $20 \mu\text{m}$ beendet werden.

3.2 Chemische Behandlung

Ein poliertes Scheibchen wird zunächst mit einem Diamantschneider in Stücke von etwa $5 \text{ mm} \times 5 \text{ mm}$ zerlegt. Der Rand wird mit einer dünnen Schicht Ätzlack geschützt.

Man bringt die Plättchen in ein Bad aus Orthophosphorsäure (98 %) bei 100°C , wo sie auf der Oberfläche schwimmen. Gasblasen, die sich nach unten ablösen treiben den Kristall hin und her, so daß stets unverbrauchte Flüssigkeit herangeführt wird und die Ätzprodukte sich verteilen. Das sollte eine gleichmäßige

ge Abtragung ergeben, was man noch durch Rühren unterstützen kann. Bei einer Abtragrate von 2-5 $\mu\text{m}/\text{min}$ sind in einigen Minuten etwa 10 μm abgeätzt, das Plättchen wird gereinigt und zur anderen Seite gedreht.

Beidseitiges Ätzen ist erforderlich, da zum einen die vorausgehende Kaltbehandlung eine zerstörte Schicht von einigen μm Tiefe hinterläßt, zum anderen Proben, deren Oberflächen unterschiedlich bearbeitet werden unter Spannungen stehen, die sich in starkem Durchbiegen bemerkbar machen.

In der Endphase des Ätzvorgangs treten am unversehrten Rand Löcher auf, die sich rasch über einen großen Teil der Randlinie ausbreiten. Wenn nur noch eine schmale Zunge Materials mit dem Rand verbunden ist, entfernt man die Probe aus der Lösung. Eine nochmalige intensive Reinigung muß jede Spur der Ätzflüssigkeit abwaschen, da sonst nach Tagen Gruben und Löcher erscheinen.

Schließlich wird der Kristall, der jetzt eine nutzbare Fläche von etwa $0,5 \times 2 \text{ mm}^2$ hat, auf einer Aluscheibe über einer 0,3 mm-Bohrung aufgefangen und mit einem Tropfen Kanadabalsam fixiert.

3.3 Untersuchung der endbearbeiteten Proben

3.3.1 Dickenmessung

Zur genauen Bestimmung der Dicke der Kristallplättchen läßt sich die Messung des mittleren Energieverlusts von Teilchen definierter Einfallenergie heranziehen. Als Quelle wird ein Americium-Eichpräparat, zur Registrierung der durchgehenden Teilchen ein Siliziumhalbleiterdetektor (Auflösung 16 keV) verwendet. Am-241 ist ein Alphastrahler mit zwei scharfen Linien bei 5,482 und 5,439 MeV, deren Abstand 43 keV man zur Energieeichung benutzen kann. Beim Experiment ist darauf zu achten, daß die Richtung in der die Probe durchstrahlt wird, nicht in die Nähe einer niedrigindizierten Gitterrichtung fällt.

Die untersuchten Kristalle zeigen einen Energieverlust von 500-1000 keV, was bei einem Bremsvermögen von $\approx 300 \text{ keV}/\mu\text{m}$ einer mittleren Dicke von 1,5-3,5 μm entspricht.

Die Energiebreite des einfallenden Strahls ist allein durch die Auflösung des Detektors gegeben. Aus der Verbreiterung nach dem Durchgang durch die Probe läßt sich bei Berücksichtigung der Vielfachstreuung die Abweichung von der mittleren Dicke ermitteln. Sie ist in der Größe von 5 %.

3.3.2 Gütebestimmung

Eine Inspektion der Kristalloberflächen im Mikroskop wird in vielen Bereichen durch intensive Farberscheinungen erschwert.

Es stellt sich heraus, daß die Zahl der Grübchen nach dem Ätzen erheblich (2 bis 10 mal) zugenommen hat. Außerdem sind die kleinen Dellen stark vergrößert und haben nun einen Durchmesser von $\approx 10 \mu\text{m}$. Zusätzlich treten einige wenige kegelige oder pyramidenartige Erhebungen auf. Die Defekte sind bei allen untersuchten Proben regellos auf der Oberfläche verstreut.

Genauere Untersuchungen /7/ der Ätzfiguren von verschiedenen Lösungen auf MgO-Einkristalloberflächen lassen den Schluß zu, daß die Gruben vor allem Stufenversetzungen markieren, die an der Oberfläche enden. Die Pyramiden sind Stellen zuzuordnen, an denen sich Verunreinigungen anhäufen. Die Hügel können jedoch auch dadurch entstehen, daß beim chemischen Prozess ein Staukorn oder ein Gasbläschen längere Zeit an einer Stelle klebt.

Aus elektronenmikroskopischen Experimenten /8/ an deformierten Einkristallen kann man entnehmen, daß sich in MgO Versetzungen bevorzugt entlang den $\{110\}$ -Gleitebenen ansammeln. Auf der Oberfläche sollte also ein Liniengitter von Ätzgrübchen sichtbar sein. Dies konnte aber nie beobachtet werden.

Um näheren Aufschluß über die Qualität der kristallinen Struktur zu bekommen, bedient man sich der Kanalografie /⁹/ . Diese Methode ist geeignet, planare und axiale Richtungseffekte bei Proben zwischen 1-10 μ m Dicke sichtbar zu machen.

Die Kanalogramme werden in einer separaten kleinen Vakuumkammer aufgenommen. Alphateilchen aus einer 30 μ Ci-Americium-Quelle fallen in einem Raumwinkel von $\approx 2\pi$ unter allen Richtungen auf den Kristall. Das Präparat hat einen Durchmesser von 3 mm und leuchtet die Probe, die nur 1 mm vor der Quelle liegt, ganz aus. Ein Film zeichnet im Abstand von 10 cm die Spuren der durchgehenden Partikel auf.

Auf Grund des unterschiedlichen Energieverlusts der Teilchen in dichtgepackten Gitterebenen und außerhalb derselben ergeben sich die Projektionen der $\{100\}$ - und schwächer der $\{110\}$ -Ebenen wie in Abb. 2. Die Breite der Linien ist durch die Winkelverteilung der Teilchen in den Ebenen, aber auch durch die geometrische Anordnung von Quelle, Kristall und Film bestimmt.

Das Auftreten ungestörter, über die ganze Länge scharfer Schwärzungslinien weist auf eine brauchbare Probe hin, während Verbreiterungen, Doppellinien oder verschwommener Übergang zum Untergrund bei einem Ebenentyp anzeigen, daß das Plättchen verzerrt oder verspannt ist.

Verspannungen entstehen bei der Bearbeitung auf der Poliermaschine. Die Scheibchen wellen sich dann manchmal sofort nach dem Ablösen vom Träger. Das Ätzen kann diesen Zustand zwar aufheben, jedoch bringt man in der Umgebung von Ätzdefekten neue Verzerrungen in den Kristall ein. Schließlich können bei unvorsichtiger Behandlung und unsachgemäßer Fixierung auf dem Träger Verbiegungen auftreten, die oft so stark sind, daß jeder Anisotropieeffekt verschwindet.

Neben einem befriedigenden Kanalogramm gibt eine Blockingverteilung um die $\langle 100 \rangle$ -Richtung Auskunft über die Probe. Sie wird in der Bestrahlungsapparatur selbst aufgenommen. Der einfallende Strahl ist etwa 2° gegenüber der Richtung der Atomreihe geneigt. Ein Bereich geringer Intensität von der Größe des kritischen Winkels $\approx 0,6^\circ$ soll möglichst scharf von der nierenförmigen Verteilung um den durchgehenden Strahl abgesetzt sein (siehe Abb. 9).

4. Experimentelle Ergebnisse

Im folgenden wird kurz auf das photometrische Verfahren zur Vermessung der Filme eingegangen. Außerdem werden einige typische Aufnahmen vorgestellt und ihre charakteristischen Merkmale aufgezeigt.

Eine genauere Diskussion schließt sich nach Klärung theoretischer Begriffe und einer Modellrechnung in Abschnitt 7 an.

4.1 Behandlung der experimentellen Daten

Die belichteten Filme werden nach Herstellerangaben entwickelt. Dann werden die Negative mit einem Jena-Schnellphotometer G3 punktweise abgetastet. Es werden Messungen entlang der kreisförmigen Verteilungen, also bei $\psi = \text{konst}$ (Azimutverteilungen) und Schnitte ($\varphi = \text{konst}$) durch den Punkt $\psi = 0$, d.h. die Richtung der Atomkette durchgeführt. Die Schwärzungsverteilungen in φ und ψ liegen als digitale Information auf Lochstreifen vor und werden zunächst auf "Intensitäts"kurven umgerechnet. Es ergeben sich differentielle Azimutwinkelverteilungen $v(\varphi, z = \text{konst})$ und Schnitte $g(\psi, z = \text{konst})$.

Der Zusammenhang zwischen Teilchendichte (Teilchenzahl/cm²) und Schwärzung wird aus einer Eichkurve entnommen, die mit einem Americium-Eichpräparat bekannter Aktivität in definierter Geometrie, also mit Teilchen gleicher Energie unter Bedingungen wie die experimentellen Aufnahmen erstellt wurde.

Wegen des geringen Teilchenstroms treffen in einer Zeit von 20 Stunden bei einer Strahldivergenz von $\pm 0,1^\circ$ und einer Targetblende von 0,3 mm Durchmesser nur etwa $3 \cdot 10^6$ Teilchen durch den Kristall und konzentrieren sich auf den Film in einen Bereich von etwa 1,5 - 2 cm Ø. Bei einem Polarwinkel $\psi > 0,5^\circ$ findet man an einigen Stellen z.B. an einem dem Einschubort entsprechenden Punkt eine recht deutliche, symmetrische

d.h. eine Verteilung von einzelnen getrennten Schwärzungspunkten. Die beste Methode der Auswertung wäre in diesem Fall ein Auszählen der Teilchen mit einem Bildanalysengerät (Densitometer). Um auch solche Winkelbereiche photometrisch erfassen zu können, muß der Aufnahmespalt des Photometers weiter geöffnet werden, als es für eine gute Winkelauflösung wünschenswert ist. Bei Messungen entlang des Rings wurde als Breite $0,75^\circ$ und als Länge $0,1^\circ$ gewählt, für Schnitte durch den Kreis sind die Werte $0,01^\circ$ und $0,01^\circ$. Außerdem werden die kritischen Bereiche mehrmals überstrichen, so daß der statistische Fehler kleiner bleibt.

4.2 Streufiguren

In den Abbildungen 3-10 sind Streufiguren an einem $2\text{ }\mu\text{m}$ dicken MgO-Einkristall um die $\langle 100 \rangle$ Richtung für verschiedene Winkel ψ_e zur Atomkette dargestellt. Die Energie der einfallenden Alpha-Teilchen betrug $4,3\text{ MeV}$. Es handelt sich um Positive, also helle Bereiche entsprechen hoher Teilchendichte. Die Ordinate aller Verteilungen ist in willkürlichen Einheiten geteilt.

Bei Einschluß parallel zur $\langle 100 \rangle$ Achse $\psi_e = 0^\circ$ (Abb. 3) erhält man die übliche anomale Transmission herrührend vom Gitterführungseffekt der Reihe. Die Divergenz des Strahls war mit $\pm 0,15^\circ$ sehr groß, so daß in random Richtungen trotz der geringen Dicke der Probe Strahlarme erscheinen. Die Blockierungslinien der $\{100\}$ - und schwächer der $\{110\}$ -Ebenen ziehen sich bis zu $\psi = 0,55^\circ$ - das entspricht ungefähr ψ_{gr} (siehe Abschnitt 5) - an den zentralen Fleck heran.

Abbildung 4 ($\psi_e = 0,31^\circ$) ist typisch für den Bereich $\psi_e < 0,4^\circ$ - ein Ring gleichmäßiger Intensität. Ein Schnitt durch die Verteilung ist in Abb. 5 dargestellt. Die Abbildung zeigt ferner eine Verteilung für einen $3,3\text{ }\mu\text{m}$ dicken Kristall, die unter denselben Bedingungen aufgenommen wurde, und ein Eintrittsprofil (mit $0\text{ }\mu\text{m}$ bezeichnet), wie es nach Gleichung (5.1.18) berechnet wurde.

Innerhalb der Messgenauigkeit ist der Durchmesser des Kreises - gemessen von Maximum zu Maximum - gleich $2 \times \psi_e$. Die Verbreiterung durch Vielfachstreuung ist verglichen mit der Divergenz von $\pm 0,02^\circ$ beträchtlich. Ebenso findet starke Einstreuung in Richtung der Atomreihe statt. Bei dickeren Proben sind die Ausläufer zu größeren Polarwinkeln noch ausgeprägter und es treten die Blockierungslinien der Ebenen auf. Ein Einschußfleck erscheint bei diesen Winkeln nur, wenn der Strahl in eine niedrigindizierte Ebene gerichtet war.

Mit größerem Einfallswinkel verbreitert sich der Ring an der Einschußstelle $\varphi = 0^\circ$ (Abb. 6, $\psi_e = 0,56^\circ$), hier markiert durch den oberen weißen Strich. Die Intensität nimmt zur gegenüberliegenden Seite $\varphi = 180^\circ$ ab (Abb. 7, $\psi = 0,8^\circ$). Die Strahlarme greifen in den Kreis hinein. In Abb. 7 sind Azimutwinkelverteilungen mit $\psi = 0,4^\circ / \psi_e / 0,8^\circ / 1,0^\circ$ dargestellt.

Bei Winkeln $\psi_e > 2\psi_{kr}$ schließlich (Abb. 8, $\psi_e = 1,3^\circ$) findet man eine nierenförmige Verteilung um die Richtung des durchgehenden Strahls mit starken Blockierungserscheinungen um Ebenen und um die Richtung der Atomreihe. Ein Schnitt durch die Verteilung ist in Abb. 9 dargestellt. Für $\varphi = 180^\circ$ sind die wenigen Teilchen an der Grenze des blockierten Bereiches angesammelt. Der Schattenwinkel der Atomreihe entspricht dem aus Abb. 3 entnommenen kritischen Winkel der Gitterführung. Abb. 10 zeigt Azimutwinkelverteilungen mit $\psi = 0,4^\circ / 0,6^\circ / 0,8^\circ / 1,0^\circ$.

Die Größe des Fehlerbalkens in allen Photometerkurven ist durch die statistische Unsicherheit gegeben. Eine bestimmte konstante Schwärzung hervorgerufen von einem Eichpräparat, liefert einen Satz von Werten der Photometerintensität und eine dazugehörige Streuung der Meßwerte. Die mittlere quadratische Abweichung für die Teilchendichte gewinnt man dann aus der Schwärzungskurve

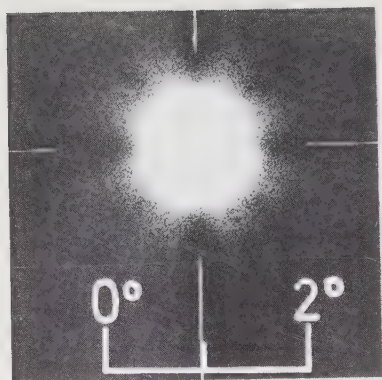


Abb. 3

Streuverteilung mit $\psi_e = 0^\circ$
(Kristalldicke $2 \mu\text{m}$,
Strahldivergenz $\pm 0,15^\circ$)

Abb. 4

Streuverteilung mit $\psi_e = 0,31^\circ$
(Kristalldicke $2 \mu\text{m}$,
Strahldivergenz $\pm 0,025^\circ$)

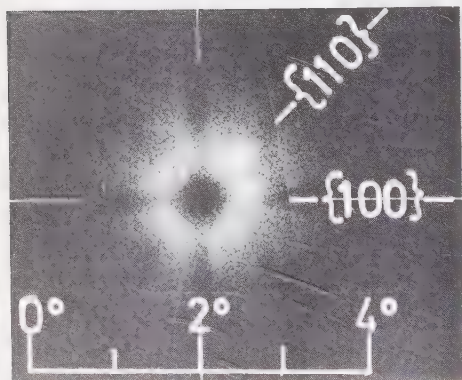
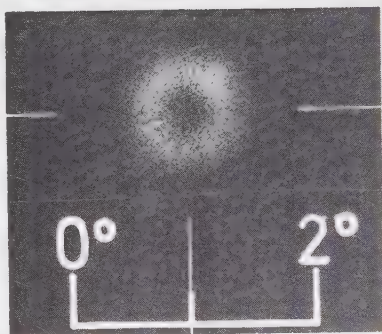
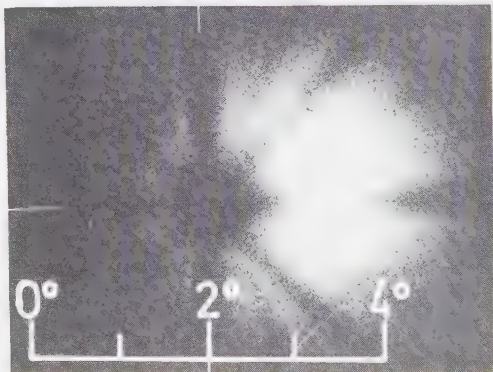


Abb. 6

Streuverteilung mit $\psi_e = 0,56^\circ$
(Kristalldicke $2 \mu\text{m}$,
Strahldivergenz $\pm 0,08^\circ$)

Abb. 8

Streuverteilung mit $\psi_e = 1,3^\circ$
(Kristalldicke $2 \mu\text{m}$,
Strahldivergenz $\pm 0,15^\circ$)



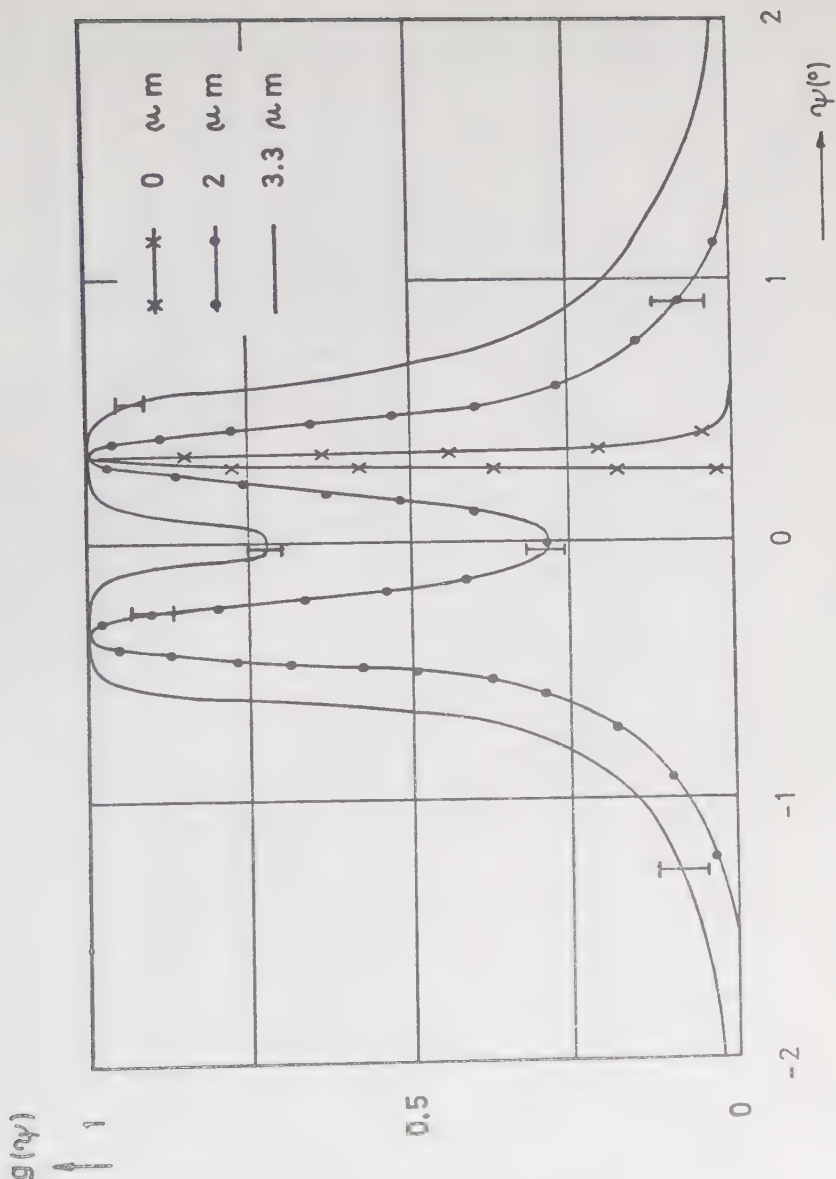


Abb. 5 Schnitt durch die Streuverteilung der Abb. 4 (Kristalldicke 2 μm) und eine Verteilung einer 3,3 μm dicken Probe. Eintrittsverteilung (Kristalldicke 0 μm) nach Gleichung (5.1.18), der linke Ast ist nicht dargestellt

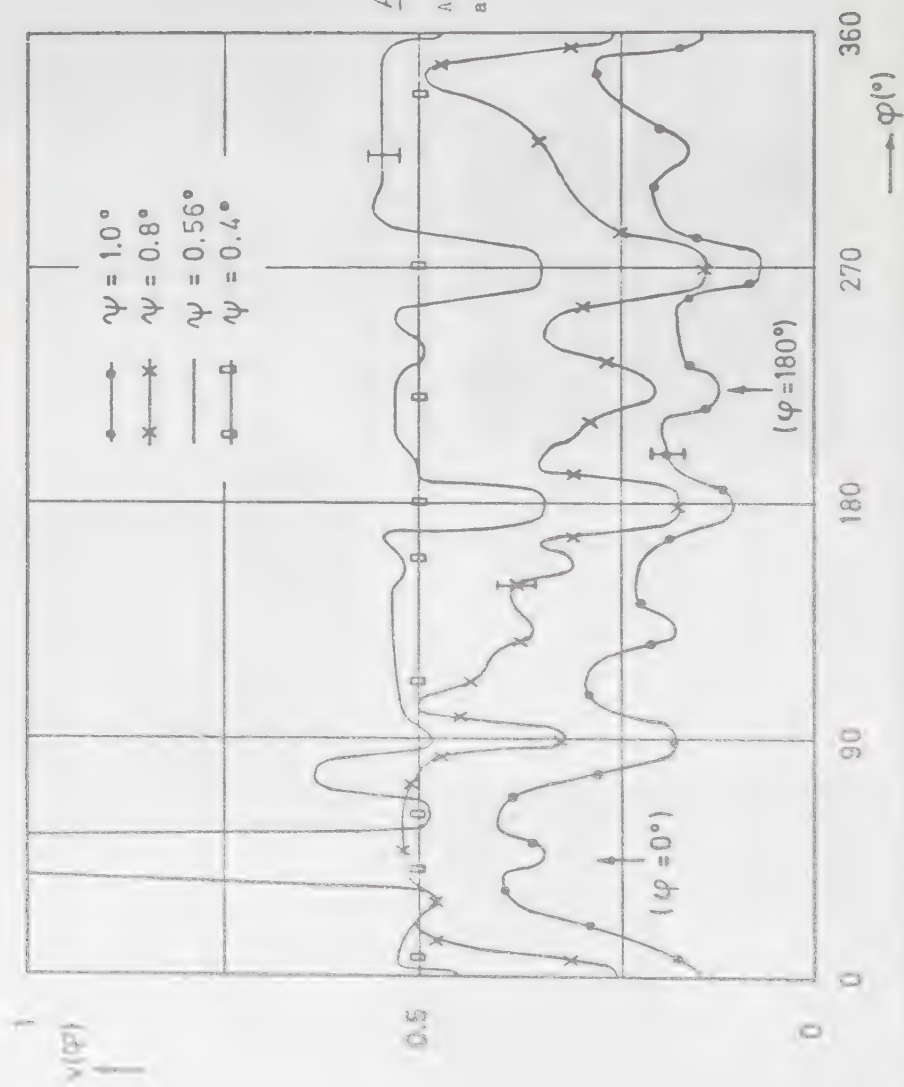


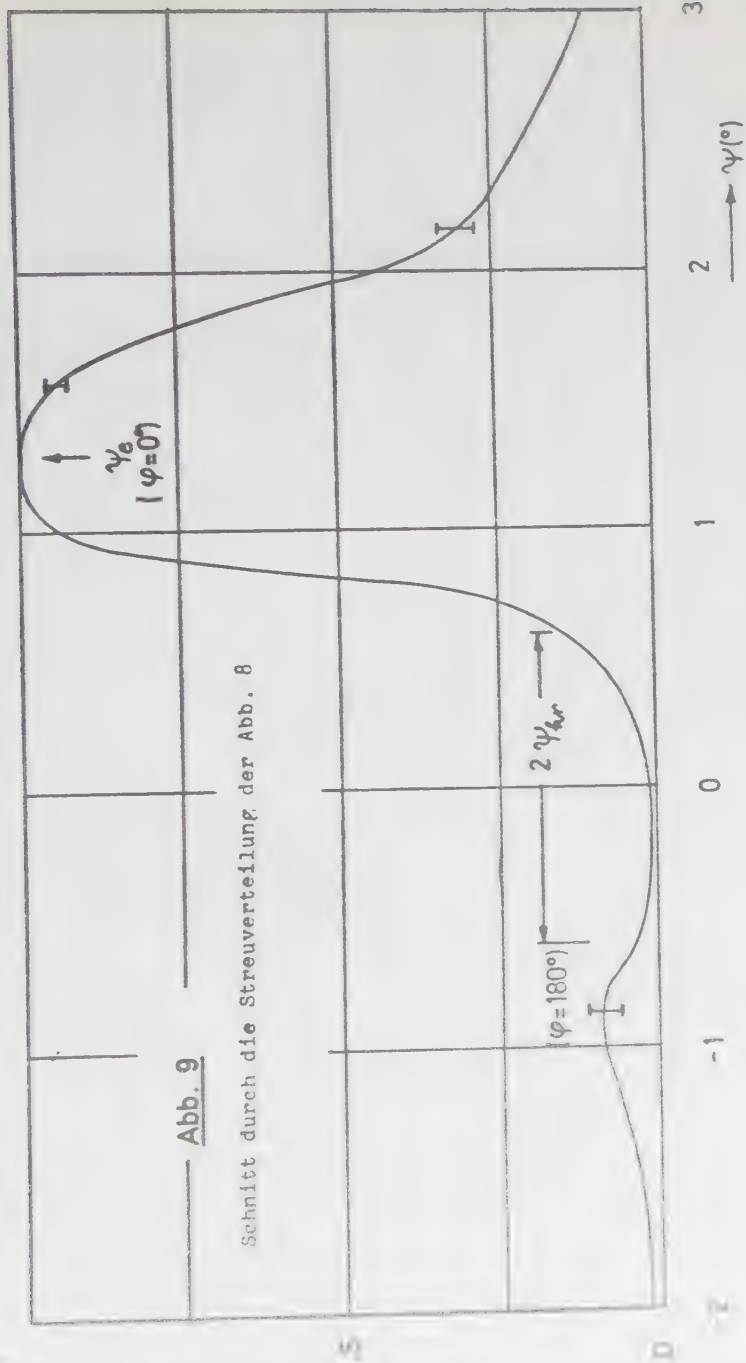
Abb. 7

Azimetverteilungen
aus Abb. 6

$D(\varphi)$
↑

Abb. 9

Schnitt durch die Streuverteilung der Abb. 8



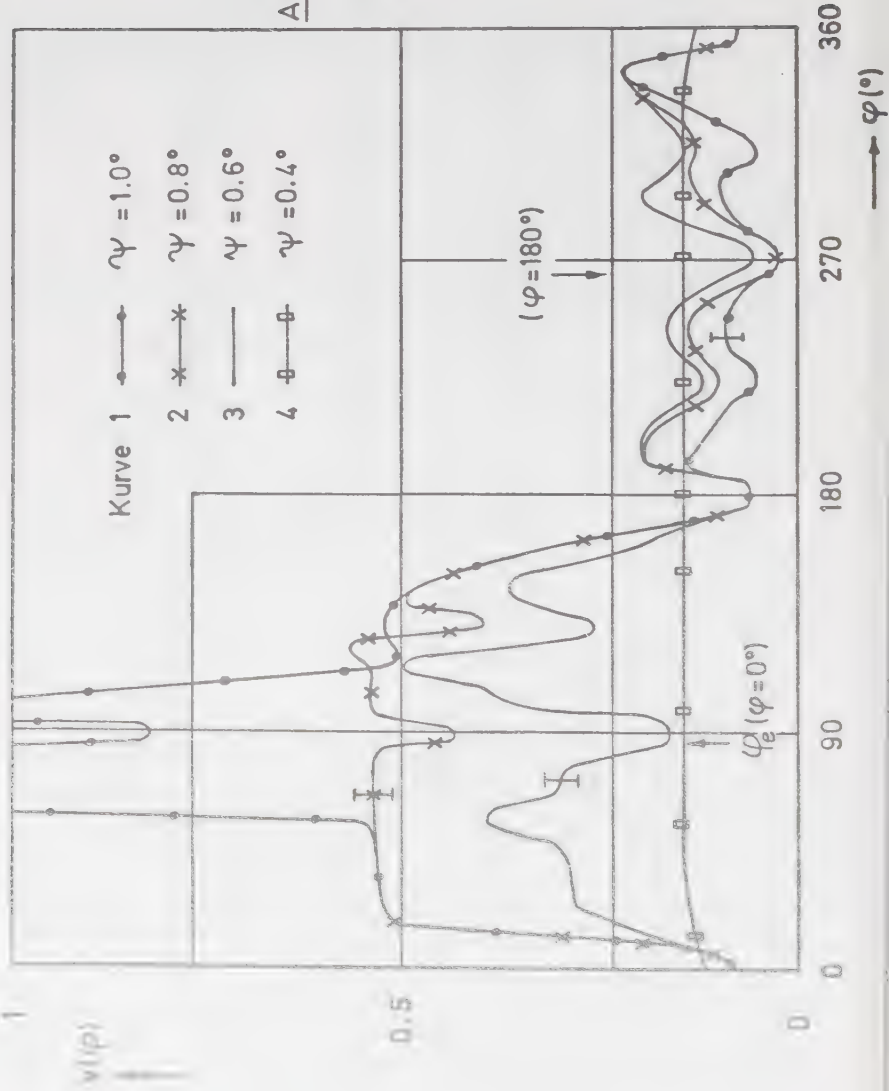


Abb.10

Azimuthverteilungen
aus Abb. 8

5. Theoretische Grundlagen

5.1 Kontinuumsnäherung

Das Kontinuumsmodell geht von den Vorstellungen der klassischen Streutheorie aus und vermag die grundsätzlichen Aspekte der Teilchenführung an Atomketten und Ebenen einfach zu beschreiben. J. Lindhard lieferte 1965 eine erste umfassende Darstellung der Theorie /1/, worauf sich die nachfolgenden Erläuterungen im wesentlichen stützen.

5.1.1 Axiale Effekte

5.1.1.1 Atomreihenpotential

Geladene Teilchen, die unter einem kleinen Winkel zu einer dichtgepackten Atomreihe starten, bewegen sich in einem Potential, das entlang der hochsymmetrischen Gitterrichtung (z-Richtung) konstant ist und sich durch Mittelung über die Potentiale der Atome in der Kette ergibt. Die Komponente der Teilchengeschwindigkeit parallel zur Reihe v_z ist eine Konstante der Bewegung, so daß $z = v_z \cdot t$. Daher kann man die dreidimensionale Bahn der Teilchen vollständig durch ihre Projektion auf die Ebene quer zur Atomkette (x-y-Ebene) beschreiben. In dieser Transversalbewegung läuft das Projektil mit einer Geschwindigkeit $v_{\perp} = v \cdot \sin \psi$ im Atomreihenpotential $U(r)$ (r Abstand von der Atomreihe). Die zweite Erhaltungsgröße ist die Gesamtenergie in der Transversalebene $E_{\perp} = U(r) + E v^2$, wobei E die Energie des Projektils. Der Kristall besteht im Kontinuumsbild aus einer regellosen Anordnung von Atomreihen in der Querebene.

Das Teilchen nähert sich bei einer Wechselwirkung der Atomreihe auf einen kleinsten Abstand $r_{\min}$, der klassisch durch die Beziehung

$$1 - \frac{v_{\perp}^2}{v^2} = \frac{U(r_{\min})}{E_{\perp}} = 0 \quad (5.1.1)$$

gegeben ist. l ist der Stoßparameter mit der Reihe. Bei der Streuung wird der Querimpulsvektor um einen Winkel $\varphi(l)$ um die Reihe gedreht. Dieser Drehwinkel bestimmt sich nach dem Stoßintegral /10/

$$\varphi(l) = \pi - 2l \int_{r_{\min}}^{\infty} \frac{dr}{r^2 \sqrt{1 - \frac{U(r)}{E_1} - \frac{l^2}{r^2}}} \quad (5.1.2)$$

und ist von der Wahl des Wechselwirkungspotentials abhängig.

Als Atomreihenpotentiale kommen das sogenannte Lindhard-Standardpotential und ein aus Atompotentialen in der Thomas-Fermi-Molière-Näherung /11/ gemitteltes in Frage. Beide Potentiale stimmen bis zu Abständen, die groß gegenüber der Abschirmung ($r \approx 10a$) sind, gut miteinander überein. Für die Berechnungen dieser Arbeit wurde das Standardpotential gewählt, da es sich analytisch einfacher behandeln läßt. Es hat die Form

$$U(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{d} \ln \left(1 + \frac{C^2 a^2}{r^2} \right) \quad (5.1.3)$$

a : Thomas-Fermi-Abschirmlänge

$$a = a_0 \cdot 0,8853 \cdot (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{-1/2}$$

a_0 : Bohrscher Radius $a_0 = 0,53 \text{ \AA}$

d : Abstand der Atome in der Kette, $d_{\langle 100 \rangle} = 2,1 \text{ \AA}$

Z_1 und Z_2 : Ladungszahl von Projektil und Targetatom

e : Elementarladung

C : Konstante, $C \approx \sqrt{3}$

Für die Target-Projektilkombination ist $a = 0,188 \text{ \AA}$. In Abb. 11 ist φ als Funktion des Stoßparameters für $\psi = 0,60^\circ$ dargestellt.

Das Kontinuumsbild ist nur gültig für Teilchen, die nicht zu nahe an die Kette herankommen, d.h. $r > r_{kr}$.

Im Fall der starren Kette kann man den Abstand kleinster Annäherung r_c , für den die Erhaltung der Querergergie noch gewährleistet ist einer analytischen Beziehung von Varelas und Sizmann /12/ entnehmen

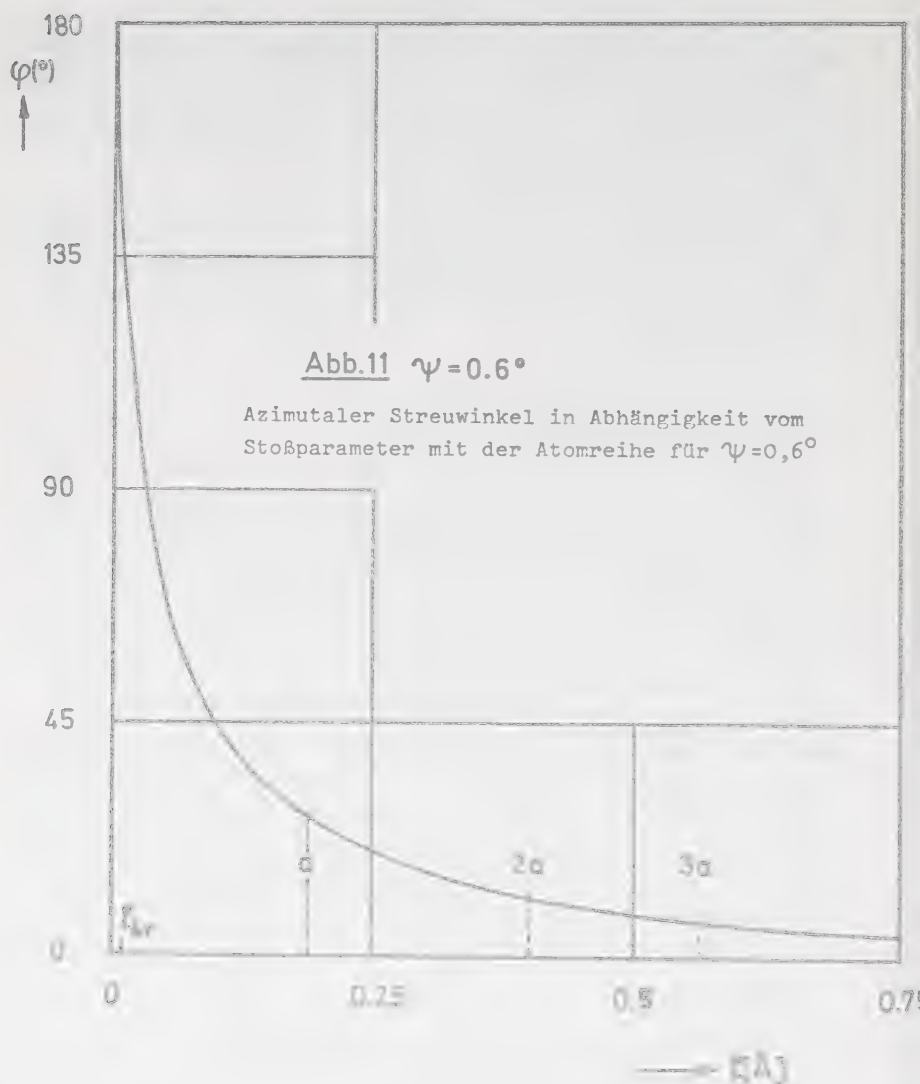
$$\left[\frac{U''(r_c)}{U'(r_c)} \right]^2 U(r_c) = \frac{E}{k^2 d^2} \quad (5.1.4)$$

k ist ein Parameter mit dem der Grad der Energieerhaltung, sozusagen die Güte der Kontinuumsnäherung eingestellt werden kann. $k \approx 0,5$ liefert eine Querergergieerhaltung auf $< 0,05 \%$ und damit wird $r_c = 0,015 \text{ \AA}$ und für $l = 0$, $\psi_c \approx 0,8^\circ$.

Durch die thermische Bewegung werden die Atome der Kette aus ihrer Gleichgewichtslage ausgelenkt. Im Debyemodell ergibt sich mit einer Temperatur $T_D = 820 \text{ K}$ /13/ für die mittlere quadratische Auslenkung senkrecht zur Atomreihe $Q^2 = 0,0076 \text{ \AA}^2$ und $Q = \sqrt{Q^2} = 0,087 \text{ \AA}$. Die Größe von r_{kr} wird demnach wesentlich durch die Bedingung $r_{kr} > Q$ bestimmt und man erhält $r_{kr}^2 \approx r_c^2 + Q^2$, was zu $r_{kr} = 0,088 \text{ \AA}$ führt. Barret /14/ und Morgan und Van Vliet /15/ erhielten aus Maschinenrechnungen eine Beziehung $r_{kr}^2 = r_c^2 + 0,72 Q^2$, die einen etwas kleineren Wert ergibt.

Zur Bestimmung von Z_2 und d sei an dieser Stelle vermerkt:

Magnesiumoxid weist eine kubisch flächenzentrierte Kristallstruktur vom NaCl-Typ mit einer Gitterkonstanten von $4,20 \text{ \AA}$ auf. In der $\langle 100 \rangle$ -Gitterrichtung wechseln sich Magnesium- und Sauer-



stoffatome mit den Ladungszahlen 12 bzw. 8 ab. Für alle Überlegungen dieser Arbeit wird diese Periodizität vernachlässigt. Man geht aus von einer hypothetischen Substanz der Kernladungszahl $Z_2 = (8 + 12)/2 = 10$, der Massenzahl $M_2 = 20$ und der Dichte $3,58 \text{ g/cm}^3$. Der Abstand der Bausteine in der $\langle 100 \rangle$ - Richtung wird $d = 2,1 \text{ \AA}$. Die Gitterstruktur ist dann kubisch primitiv. Die Atomreihe nimmt in der Querebene eine quadratische Fläche von $A_0 = d^2$ ein, oder wegen der zylindrischen Symmetrie des Kettenpotentials $A_0 = \pi r_0^2$, wenn $r_0 = d/\sqrt{\pi} = 1,18 \text{ \AA}$.

Diese Vereinfachung bringt einen gewissen Fehler mit sich. Dehnt man Gleichung (5.1.4) auf Atomketten mit Basis, d.h. in unserem Fall mit alternierenden Ladungen aus, dann zeigen sich bei der starren Reihe deutliche Unterschiede in den kritischen Größen. Der minimale Abstand wird nahezu doppelt so groß, $r_c(\text{MgO}) = 0,027 \text{ \AA}$ bzw. $\psi_c = 0,7^\circ$ ($l = 0$). Diese Verhältnisse wurden durch Modellrechnungen [12] bestätigt: Die Teilchen wurden hier in binären Einzelstreuungen an der Atomreihe reflektiert. Die Änderung der Querenergie wird durch Vergleich von Einfalls- und Ausfallswinkel geprüft.

Diese Diskrepanz wird bei hohen Projektilenergien jedoch von der Wärmebewegung ausgeglichen, so daß der Fehler für den kritischen Abstand bei 5 % liegt. Der Unterschied im kritischen Winkel (für $l = 0$) ist noch kleiner und das unter Berücksichtigung verschiedener Ladungen gemittelte Reihenpotential differiert auch bei $r = a/10$ nur um 2 %.

5.1.1.2 Verteilung im Azimutwinkel

Betrachtet man einen Ionenstrahl mit festem Anfangsimpuls $\vec{p}_{1e}$ und Azimutwinkel $\varphi_e \approx 0$ an der Oberfläche des Kristalls ($z = 0$), dann stellt sich in einer Tiefe z eine von $E_1 \sim |\vec{p}_{1e}|^2$ abhängige Verteilung $v(\varphi, z)$ ein.

Die Azimutverteilung entwickelt sich durch statistisch aufeinander folgende Streuprozesse, deren Ablauf man mit einem Diffusionsprozess vergleichen kann. Man erhält $v(\varphi, z)$ also durch Lösung der Diffusionsgleichung

$$\frac{\partial v(\varphi, z)}{\partial z} = D_{\text{rot}} \frac{\partial^2 v(\varphi, z)}{\partial \varphi^2} \quad (5.1.5)$$

im Bereich $-2\pi < \varphi < 2\pi$, wenn D_{rot} der Diffusionskoeffizient für die Drehung um die Atomreihe ist. Das ergibt für eine Punktquelle

$$v(\varphi, z) = \frac{1}{2\sqrt{\pi D_{\text{rot}} z}} e^{-\varphi^2 / 4 D_{\text{rot}} z} \quad (5.1.6)$$

Die Teilchen werden nach einer Anzahl von Streuungen über einen Winkel 2π um die Kette rotieren können. Das berücksichtigt man durch Einführen einer periodischen Randbedingung: An den Punkten $\varphi = 2\pi n$, $n = -\infty(1) + \infty$ werden diskrete Quellen mit abnehmender Intensität angeordnet, deren Beiträge sich addieren.

Man erhält

$$v(\varphi, z) = \frac{1}{2\sqrt{\pi D_{\text{rot}} z}} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-(\varphi - 2\pi n)^2 / 4 D_{\text{rot}} z} \quad (5.1.7)$$

und durch Anwendung der Fourieranalyse

$$v(\varphi, z) = \frac{1}{2\pi} \left[1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} e^{-D_{\text{rot}} n^2 z} \cos n\varphi \right] \quad (5.1.8)$$

Die Änderung des Querimpulses bei einer Einzelstreuung an der Atomkette ist gegeben durch

$$\vec{p}_1 = \vec{p}_1 e \cos \varphi \quad (1) \quad (5.1.9a)$$

$\vec{p}_1$ nach Erreichen einer Tiefe z errechnet sich aus der Wahrscheinlichkeitsdichte für φ in dieser Tiefe (Gleichung 5.1.8) durch Mittelung über alle Winkel

$$\vec{p}_1(z) = \int_0^{2\pi} \vec{p}_1 e \cos \varphi \cdot v(\varphi, z) d\varphi \quad (5.1.9b)$$

Nimmt man eine genügend große Eindringtiefe, also nicht zu dünne Targets an, so daß die Glieder mit $n > 1$ abgeklungen sind, dann führt die Integration zu

$$\vec{p}_1(z) = \vec{p}_1 e^{-D_{\text{rot}} z} \quad (5.1.10a)$$

Das bedeutet, daß sich die Anfangsimpulsverteilung nach einem einfachen Zerfallsgesetz umordnet. Die mittlere freie Weglänge für den Prozess ist

$$\lambda_{\text{rot}} = \frac{1}{D_{\text{rot}}} \quad (5.1.10b)$$

wobei D_{rot} per definitionem

$$D_{\text{rot}} = \frac{\langle \varphi^2 \rangle}{2 z_0} \quad (5.1.11)$$

$\langle \varphi^2 \rangle$ ist hier der mittlere quadratische Drehwinkel und z_0 die Wechselwirkungslänge des Teilchens mit der Kette in Vorwärtsrichtung. In der Transversalebene bewegt sich ein Teilchen pro Streuung im Mittel um $2 r_0$, daher ist $z_0 \approx 2 r_0 / \langle \varphi \rangle$. Der mittlere quadratische Streuwinkel ist durch die Beziehung

$$\langle \varphi^2 \rangle (E_{\perp}) = \frac{1}{r_0} \int_{l_{kr}}^{r_0} \varphi^2 (l, E_{\perp}) dl \quad (5.1.12)$$

dargestellt. Als untere Integrationsgrenze wird $l = l_{kr}$ gesetzt, $l_{kr}(\psi, r_{kr})$ aus Gleichung (5.1.1). Gleichung (5.1.12) wurde für verschiedene Querenergien numerisch ausgewertet. Die Ergebnisse sind zusammen mit D_{rot} und λ_{rot} in Tabelle I angeführt.

Man erkennt, daß für $\psi = 0,4^\circ$ - ein Polarwinkel der Größe des kritischen Winkels - $\lambda_{rot} \approx 1000 \text{ \AA}$ (500 Atomlagen) ist und somit eine Gleichverteilung im Azimutwinkel schon in geringer Tiefe erfolgen wird.

Ein gutkollimierter Teilchenstrahl hoher Energie, wie er bei den meisten Gitterführungsexperimenten zu erwarten ist, wird auf diesem kurzen Weg nicht merkbar durch querenergieändernde Effekte (siehe Abschnitt 5.2) beeinflusst werden. Bei Proben mit einer Dicke $> 1 \mu\text{m}$ ist unter diesen Umständen die Annahme einer Gleichverteilung unmittelbar an der Kristalloberfläche gerechtfertigt. Diese Vereinfachung ist im Winkelbereich $\psi_{kr} < \psi < 2\psi_{kr}$ nicht mehr erlaubt. Um Aussagen auch für solche Winkel machen zu können, wird der Mechanismus der Streuung um die Reihe in Abschnitt 6 genauer untersucht.

5.1.1.3 Querenergieverteilung

Beim Übergang aus dem potentialfreien Raum gewinnt ein Teilchen, das mit einem Winkel ψ_e gegenüber der Richtung der Atomreihe in den Kristall einfällt eine von r abhängige potentielle Energie hinzu, so daß

$$E_{\perp} = E\psi_e^2 + U(r) \quad (5.1.13)$$

Nach Einstellung der azimuthalen Gleichverteilung ist die Wahrscheinlichkeit, im Kristallinnern eine Energie zwischen $E_{\perp}$ und $E_{\perp} + dE_{\perp}$ zu erhalten proportional zum getroffenen Flächenelement dr^2 und gleich

$$p(E_{\perp}, E\psi_e^2) = \int_0^r \frac{dr^2}{r_0^2} \delta(E_{\perp} - E\psi_e^2 - U(r)) \quad (5.1.14)$$

Das Teilchen findet sich gleichwahrscheinlich im erreichbaren Raum $A(E_{\perp}) = \pi(r_0^2 - r_{\min}(0)^2)$ verteilt, wobei $r_{\min}(0)$ aus $E_{\perp} = U(r_{\min})$ zu entnehmen ist. Für ein Standardpotential hat p nach Einführung reduzierter Größen /16,21/ die Form

$$p(\varepsilon_{\perp}, \varepsilon_{1e}) = \frac{2}{E\psi_1^2} \frac{C_a^2}{r_0^2} \frac{e^{\varepsilon_{\perp} - \varepsilon_{1e}}}{(e^{\varepsilon_{\perp} - \varepsilon_{1e}} - 1)^2} \quad (5.1.15)$$

wobei $\varepsilon_{\perp} = 2(\psi/\psi_1)^2$ und $\psi_1 = 0,48^\circ$ der Lindhardwinkel.

Es gilt $\varepsilon_{\perp} > \varepsilon_{1e} + \varepsilon_{10}$ mit $\varepsilon_{1e} = 2(\psi_e/\psi_1)^2$ und $\varepsilon_{10} = \ln(1 + \frac{C_a^2}{r_0^2})$,

der kleinste Betrag der Querenergie an der Grenze der Einheitsfläche.

Der auftreffende Teilchenstrahl habe um ψ_e eine gewisse Winkelbreite, also eine Verteilung $f(E\psi_e^2)d(E\psi_e^2)$. Dann ergibt sich die Anfangsverteilung bei $z=0$ aus

$$g(\varepsilon_{\perp}, 0) = \frac{E\psi_1^2}{2} \int f(\varepsilon_{1e}) p(\varepsilon_{\perp}, \varepsilon_{1e}) d\varepsilon_{1e} \quad (5.1.16)$$

Bei diesen Experimenten kann ein kastenförmiges Strahlprofil mit einer Breite $\Delta\varphi$ und $\Delta\psi$ (beide von der Größe $0,05^\circ$) zu Grunde gelegt werden (siehe Abb. 12). Das bedeutet für die Querenergieverteilung

$$f(\psi_e)\psi_e d\psi_e = \frac{\Delta\varphi}{2\pi} \frac{\psi_1^2}{4} d\varepsilon_{1e} \quad \psi_n < \psi_e < \psi_m \quad (5.1.17)$$

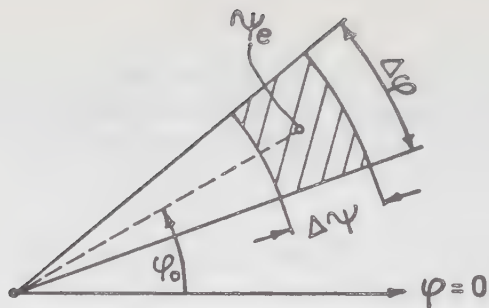


Abb.12 Bezeichnung der Größen zur Berechnung der
Einschußverteilung in Abschnitt 5.1.1.3

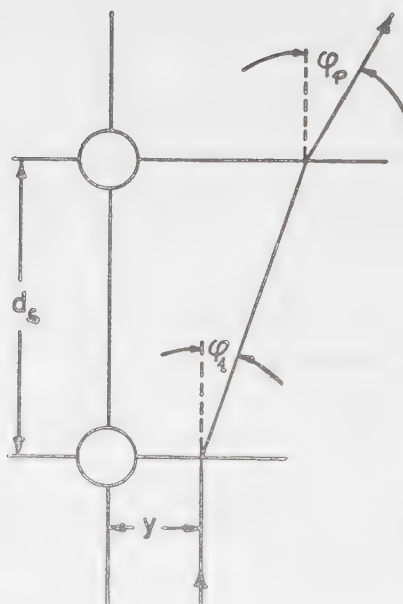


Abb.13 Bezeichnung der Größen zur Bestimmung des
mittleren quadratischen Drehwinkels eines
"Atomreihenpaares" in Abschnitt 5.1.2.1

mit $\Delta\psi = \psi_m - \psi_n$.

Damit wird die Eintrittsverteilung im Kristallinnern

$$\varepsilon(\varepsilon_{\perp}, 0) = \frac{\Delta\varphi}{8\pi} \psi_i^2 \frac{C_0^2}{r_0^2} \times \begin{cases} \left\{ \frac{1}{e^{\varepsilon_{\perp 0} - 1}} - \frac{1}{e^{\varepsilon_{\perp} - \varepsilon_{\perp m} - 1}} \right\} & \varepsilon_{\perp m} + \varepsilon_{\perp 0} < \varepsilon_{\perp} < \varepsilon_{\perp m} + \varepsilon_{\perp 0} \\ \left\{ \frac{1}{e^{\varepsilon_{\perp} - \varepsilon_{\perp m} - 1}} - \frac{1}{e^{\varepsilon_{\perp} - \varepsilon_{\perp n} - 1}} \right\} & \varepsilon_{\perp} > \varepsilon_{\perp m} + \varepsilon_{\perp 0} \end{cases} \quad (5.1.18)$$

$\varepsilon_{\perp m}$ und $\varepsilon_{\perp n}$ sind durch ψ_m und ψ_n bestimmt. Die Funktion ist in Abbildung 5 gegen den Polarwinkel aufgetragen. Vergleicht man die geringe Verbreiterung durch das Kristallpotential mit der bei den gemessenen Kurven festgestellten, dann erkennt man, daß auch bei $\psi < \psi_{kr}$ die Prozesse der Vielfachstreuung das Bild der Winkelverteilung maßgeblich beeinflussen (siehe dazu Abschnitt 5.2).

5.1.2 Ebeneneffekte

5.1.2.1 Schattenbildung

Das Auftreten starker $\{100\}$ - und $\{110\}$ -Ebenen, die für $\psi \gg \psi_{kr}$ den Ring um die $\langle 100 \rangle$ Richtung in Segmente deutlich unterschiedlicher Intensität zerteilen, macht die Annahme regellos in der Querebene verstreuter Reihen unhaltbar. Die Teilchen erfahren eine anisotrope Dichte der Streuer.

Im Rahmen der Gültigkeit des Kontinuumsbildes kann eine niedrig-indizierte Gitterebene als eine Kette von Atomreihen (die sich in x-Richtung hinziehe) mit gegenseitigem Abstand d_g ($= d$ für die $\{100\}$ und $d \cdot \sqrt{2}$ für die $\{110\}$ Ebene) angesehen werden. Projektilen, die unter großen Winkeln φ gegen eine Ebenen-

richtung laufen, benötigen um in die Richtung der Ebene eingelenkt zu werden eine Streuung mit kleinem Stoßparameter. Mit diesem Abstand starten sie parallel zu den hintereinander liegenden Reihen und werden so besonders stark wieder herausgestreut. Der Azimutwinkelbereich um die Ebene wird von Teilchen weitgehend freigehalten.

In Analogie zur Atomreihe läßt sich ein gemitteltes Ebenenpotential $Y(y)$ als Funktion des Abstandes von der x-z-Ebene einführen /1/. Im Gegensatz zur Reihe nimmt Y bei $y=0$ einen endlichen Wert $E_B = \pi Z_1 Z_2 e^2 N d_p$ Ca(d_p Abstand der Ebenen) an, so daß der kritische Winkel ϕ_{kr} für die eindimensionale Bewegung durch $E_B = E \phi_{kr}^2$ gegeben ist. Das bedeutet, daß Teilchen mit $\phi > \phi_{kr}$ ($\approx 0,23^\circ$ für die $\{100\}$ -Ebene) die Potentialbarriere überwinden und die Ebenenstruktur nicht mehr sehen. Da $\phi \approx \psi \varphi$ und der Schattenwinkel ϕ_s von derselben Größe wie der kritische Winkel ist, $\phi_s \approx \phi_{kr}$, erhält man in der Querebene einen Winkelbereich φ_s (15° bis 20°) um die Gitterebenen, in dem die Teilchen ein überdurchschnittlicher Streueffekt erwartet.

Um eine Abschätzung für den mittleren quadratischen Streuwinkel im blockierten Bereich zu bekommen, sei die Ebene durch zwei Reihen genähert (siehe Abb. 13). Projektile, die parallel zu dieser Anordnung einfallen, erleiden eine Ablenkung um

$$\varphi_p(y) = \varphi_1(y) + \varphi_2(y + d_s \times \operatorname{tg} \varphi_1(y)) \quad (5.1.19a)$$

Den mittleren Drehwinkel finden wir durch Integration über den zugelassenen Stoßparameterbereich

$$\langle \varphi^2 \rangle_p = \frac{1}{y_{\max} - y_{kr}} \int_{y_{kr}}^{y_{\max}} \varphi_p^2(y) dy \quad (5.1.19b)$$

Die untere Grenze $y_{kr} = l_{kr}$, der Stoßparameter, der die Gültigkeit des Reihenpotentials sichert. Die Teilchen aus dem

Schatten verlassen die Ebene mit $\varphi_p \gg \varphi_s$, das entspricht beim Eintritt einem Abstand $y \leq y_{\max}$. Die obere Grenze liefert Gleichung (5.1.19a), wenn man $\varphi_p(y_{\max}) = \varphi_s$ setzt. In Tabelle I sind einige Werte von $\langle \varphi_p^2 \rangle$ und $y_{\min}$ zusammengefasst. Vergleicht man sie mit Werten $\langle \varphi^2 \rangle$ für die regellose Anordnung, wo alle Stoßparameter $l > 0$ gleichwahrscheinlich sind, dann zeigt sich eine deutliche Zunahme. Die entsprechenden Werte für die $\{110\}$ Ebenen fallen wie erwartet kleiner aus.

Für beide Ebenenarten unterscheidet sich die Streuwirkung allein durch die Dichte der Ketten, die proportional zu $\frac{1}{d}$ ist, woraus folgt $\frac{\langle \varphi^2 \rangle_{\{110\}}}{\langle \varphi^2 \rangle_{\{100\}}} \approx \sqrt{2}$.

Allgemein überwiegt im Bereich sehr kleiner Stoßparameter in Gleichung (5.1.19a) der Term $\varphi_1(y)$. Die Wirkung der nachfolgenden Reihen sieht das Teilchen erst bei größerer Entfernung. Dieser Effekt kann bei niedrigen Querenergien ($\psi_e < 0,4^\circ$) dominieren, wenn selbst für $y \approx d_p/2$ die Drehwinkel etwa gleich dem Schattenwinkel sind. Dann deckt die erste Reihe die nächsten stets ab, die Ebenenstruktur verschwindet, was sowohl im Experiment (Abb. 10, Kurve 4) als auch in den Modellrechnungen (Abb. 17) bestätigt wird.

5.1.2.2 Führungseffekt

Völlig andere Verhältnisse ergeben sich, wenn ein Strahl mit kleiner Winkelbreite $\Delta\theta < \theta_{kr}$ nahezu parallel zur Ebene eingeschossen wird. Die Teilchen bleiben im gemittelten Ebenenpotential über Tiefen von einigen Mikrometer gefangen.

Die Bahnen oszillieren zwischen zwei oder mehreren anliegenden Ebenen hin und her und nähern sich dem begrenzenden Wall nur auf $y < y_{kr}$, wo $Y(y_{kr}) = E \theta_{kr}^2$ und $y_{kr} \approx a$. Die Erhaltung der Querenergie ist gut gewährleistet, da die thermische Auslenkung der Atome aus der Ebene wegen $y_{th} \approx 0,062 \text{ \AA} \ll a$ nicht gesehen wird.

$\psi(^{\circ})$	0,2	0,4	0,6	0,8	1,0
$r_{kr}(\text{\AA})$	0,07				
$l_{kr}(\text{\AA})$	0	0	0,0113	0,047	0,0565
$\langle \varphi^2 \rangle$	1,75	0,651	0,206	0,0525	0,0327
$\sqrt{\langle \varphi^2 \rangle} (^{\circ})$	76	46	26	13	10
$D_{rot} \cdot 10^4 (1/\text{\AA})$	13	9,63	4,6	1,55	1,2
$\lambda_{rot}(\text{\AA})$	770	1040	2200	6400	8300
$\langle \varphi^2 \rangle_{\{100\}p}$	-	1,1	0,53	0,13	0,07
$y_{min} \{100\}(\text{\AA})$	-	0,68	0,4	0,27	0,18
Modellrechnung					
$\langle \varphi^2 \rangle_{100}$	2,22	1,135	0,54	0,10	0,054
$\langle \varphi^2 \rangle_{110}$	-	-	0,19	0,047	0,022
$\langle \varphi^2 \rangle_{rand}$	1,85	0,55	0,168	0,032	0,011
$\sqrt{\langle \varphi^2 \rangle}_{rand} (^{\circ})$	78	42	23	10	6
$D_{100} \cdot 10^4 (1/\text{\AA})$	-	16,8	12	3	2
$D_{110} \cdot 10^4 (1/\text{\AA})$	-	-	4,3	1,4	0,8
$D_{rand} \cdot 10^4 (1/\text{\AA})$	13,4	8	3,7	0,95	0,4

Tabelle 1 : Mittlerer quadratischer Drehwinkel und Diffusionskoeffizient der azimuthalen Streuung von Theorie und Modellrechnung

Diese Stoßparameterauswahl, die im übrigen komplementär zu der beim Blockierungseffekt ist, reduziert die azimutale Streuwirkung drastisch. Errechnet man im Bild des Atomreihenpaares den mittleren quadratischen Streuwinkel, dann findet man für in der Ebene geführte Teilchen $\langle \varphi^2 \rangle^e = 0,01$ (aus der Modellrechnung $\langle \varphi^2 \rangle^e = 0,0014$), einen 20 mal kleineren Wert als in der regellosen Anordnung.

Über eine Tiefe von 2 μm sollte die schmale Einschlußverteilung ($\Delta \vartheta = \pm 0,03^\circ$) also nahezu ungestört bleiben. Das Experiment (Abb. 14) zeigt jedoch eine deutliche Aufstreuung ($\approx \pm 0,16^\circ$) nicht nur quer zur Ebene, sondern auch entlang derselben ($\approx \pm 0,16^\circ$), wo in der Kontinuumsnäherung bei konstantem Potential überhaupt kein Effekt zu erwarten ist.

Die Verbreiterung ist atomaren und elektronischen Vielfachstreu- prozessen zuzuschreiben, deren Wirkung durch eine Diffusion der Teilchen in der Querebene befriedigend dargestellt /17/ werden kann. Auf Grund der einfachen Geometrie hat man nur die Impuls- komponente quer zur Ebene zu beachten, oder was für nahezu pa- rallelen Einfall wegen $E_\perp = E\vartheta^2 \approx Y(y)$ äquivalent ist, den Winkel ϑ der Teilchen gegen die Ebene am Ort zwischen zwei Ebenen. Die Diffusionsgleichung schreibt sich dann wie

$$\frac{\partial n_\perp(\vartheta, z)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(D_\perp \frac{\partial n_\perp(\vartheta, z)}{\partial \vartheta} \right) \quad (5.1.20)$$

$n_\perp(\vartheta, z)$ ist die transversale Verteilung in einer Tiefe z . Der Diffusionskoeffizient $D_\perp(\vartheta)$ enthält die "nuklearen" Prozesse herrührend von der thermischen Bewegung der Gitteratome und sol- le demnach querenenergieabhängig sein. Rechnungen /18/ und ver- schiedene Experimente /17, 19/ deuten darauf hin, daß bei Tar- gets mit niedrigem Z_2 die inelastische Komponente von der Streuung an den Kristallelektronen überwiegt und der transver- sale Diffusionskoeffizient in dem den gutgeführten Teilchen zu- gänglichen Querenenergiebereich konstant ist.

Für die Bewegung in lateraler Richtung kann man eine zweite identische Gleichung mit $n_{||}(\psi, z)$ und $D_{||}$ ansetzen. $D_{||}$ ist in guter Näherung konstant und allein vom elektronischen Anteil bestimmt.

Die Randbedingungen sind $n_{\perp}(\phi_{kr}, z) = n_{\perp}(-\phi_{kr}, z) = 0$ und $n_{||}(\pm\infty, z) = 0$. In der Querbewegung endet der Führungseffekt bei $\phi = \phi_{kr}$ an einer Senke.

Als Anfangsbedingung hat man für die Lateralbewegung die experimentell vorgegebene kastenförmige Verteilung $n_{||}(\psi, 0) = 1$ für $-\psi_0 < \psi < \psi_0$ und $n_{||}(\psi, 0) = 0$ sonst. Für die Diffusion quer zur Ebene kommt eine Verbreiterung durch das Potential hinzu, die aber so gering ist, daß sie vernachlässigt werden kann.

Die Lösung für die Diffusion entlang der Ebene lautet dann /20/

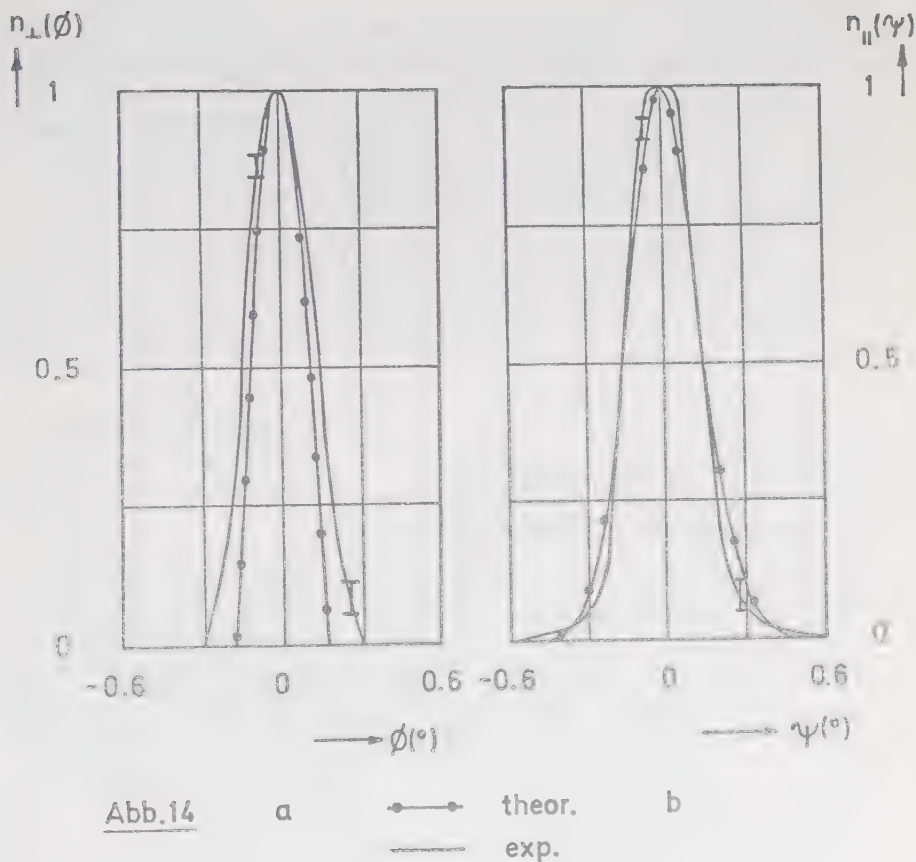
$$n_{||}(\psi, z) = \frac{1}{2} * \left\{ \operatorname{erf} \left(\frac{\psi_0 - \psi}{2 \sqrt{D_{||} z}} \right) + \operatorname{erf} \left(\frac{\psi_0 + \psi}{2 \sqrt{D_{||} z}} \right) \right\} \quad (5.1.21a)$$

Entsprechend erhält man die Verteilung quer

$$n_{\perp}(\phi, z) = \frac{4}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{2n+1} * \sin \left[\frac{(2n+1)\pi \phi}{2 * \phi_{kr}} \right] * \cos \left[\frac{(2n+1)\pi \phi}{2\phi_{kr}} \right] * \exp \left[-D_{\perp} (2n+1)^2 \pi^2 z / 4 \phi_{kr} \right] \quad (5.1.21b)$$

Beide Gleichungen sind für $D_{\perp} = D_{||} = \frac{1}{2} \left(\frac{\delta \Omega^2}{\delta z} \right)_{ch}$ (siehe dazu Abschnitt 5.2.1) ausgewertet und mit gemessenen Verteilungen verglichen (Abb. 14).

Die Übereinstimmung ist für den Fall der lateralen Verteilung befriedigend. Bei der transversalen Kurve sind die Abweichungen



Streuverteilung bei Einschub in eine $\{100\}$ -Ebene ($\psi_e = 2^{\circ}$)

- a) Schnitt quer zur Ebene
- b) Schnitt längs der Ebene

beträchtlich. Das deutet darauf hin, daß die Annahmen hier zu sehr vereinfachen und der Einfluß des Potentials nicht zu vernachlässigen ist.

Der Bruchteil der Projektile, die nach einer "Eindringtiefe" von $2 \mu\text{m}$ aus der Ebene in den ungeführten Strahl gestreut wurden, ergibt sich aus einer Teilchenbilanz zu 15-20 %. Die Tiefe nach der die Hälfte der Teilchen aus der Ebene entwichen ist (Halbwertsdicke) ist also $> 2 \mu\text{m}$ (etwa $8 \mu\text{m}$). Das stimmt mit Ergebnissen anderer Experimentatoren /17/ überein.

5.2 Abweichungen von der Kontinuumsnäherung

5.2.1 Vielfachstreuung

Angesichts einer umfangreichen Literatur /16,21-25/ zu diesem Thema seien hier nur grundsätzliche Überlegungen angestellt, die eine Beschreibung der radialen Verbreiterung der Azimutverteilungen in groben Zügen ermöglichen sollen.

Die Hauptursachen für eine Verletzung der Querernergieerhaltung sind die thermische Bewegung der Gitterbausteine, die die Symmetrie der Atomreihe und die Korrelation zwischen aufeinanderfolgenden Ablenkungen zerstört und die inelastische Wechselwirkung der Teilchen mit den Kristallelektronen. Beide Vielfachstreuungseffekte addieren sich und führen zu einer Vergrößerung der Querernergie.

In einer amorphen Substanz ist die Streuung an den Elektronen vernachlässigbar, da sie um einen Faktor $2 \approx Z_2 L_n / L_e \approx 50$ kleiner als die Streuung an den thermisch bewegten Gitteratomen ("nukleare" Streuung) ist. Das gilt auch für Teilchen hoher Querernergie im Kontinuumsbild ($\psi > 2\psi_{kr}$). Die mittlere quadratische Winkeländerung durch nukleare Streuung ($\delta\Omega^2$)_n pro Weglängeneinheit ist gegeben durch

$$\left(\frac{\delta\Omega^2}{\delta z} \right)_n = \frac{m_e}{M_1 E} \frac{Z_2 L_n}{L_e} \left(\frac{\delta E}{\delta z} \right)_e \quad (5.2.1)$$

m_e : Elektronenmasse

M_1 : Projektilmasse

L_n und L_e von der Target-Projektilkombination abhängige Konstante, wobei $L_n \approx 8$ und $L_e \approx 3$

$(\frac{\delta E}{\delta z})_e$: elektronisches Bremsvermögen in der Näherung von Bethe-Bloch

Im vorliegenden Fall ist $(\frac{\delta \Omega^2}{\delta z})_n \approx 3 \cdot 10^{-8} \left[\frac{1}{\text{\AA}} \right]$.

Der geführte Strahl hält sich vornehmlich in großem Abstand von der Kette $r > a$, im Gebiet geringen Potentials auf. Die nukleare Wechselwirkung ist dort stark vermindert und die elektronische Vielfachstreuung $(\delta \Omega^2)_e$ kann überwiegen.

$$\left(\frac{\delta \Omega^2}{\delta z} \right)_e = \frac{m_e}{2M_1 E} \left(\frac{\delta E}{\delta z} \right)_{ch} \quad (5.2.2)$$

$\left(\frac{\delta E}{\delta z} \right)_{ch} = c \left(\frac{\delta E}{\delta z} \right)_e$, wobei c von der Größe $1/2$.

Schwer erfassbar, aber sehr kritisch für den Verpufferungsprozess ist der Übergangsbereich $L_{tr} < \eta < 2\eta_{kr}$. Die Streukräfte wirken auf einen Abstand $r \approx Q$ wo die Atomkerne herum und verursachen die Fluktuationen der Kraft, die von den einzelnen, stark chaotisch-ausgelenkten Atomen hervorgerufen werden. Die Analyse des Effekts wird empfindlich vom Abstand abhängen und maßgeblich die Rate beeinflussen, mit der die Teilchen ihre kinetische Energie ändern und dann in den ungeführten Strahl getrennt werden.

Eine Abschätzung für die Änderung der mittleren kinetischen Energie $\langle E_k \rangle$ als Funktion von E_k wurde in [5,16] gemacht. Die Ergebnisse führen zu einer Diffusionskoeffizienten, der für $E_k \ll E_{tr}$ wie $E_k^{1/2}$ ansteigt und bei hohem E_k und η_2 von inelastischen Anteil bestimmt wird.

Van Vliet /18/ findet bei hohen Projektilenergien und Targets mit niedrigem Z_2 in einem Bereich von über 90 % der Einheitsfläche eine konstante elektronische Winkeldispersion. Erst nahe an der Atomreihe $r < a/2$ wird die nukleare Aufstreuung spürbar.

5.2.2 Diffusionsgleichung für die Quererergie

Die Entwicklung der radialen Winkelverteilung $g(\psi, z)$ unter dem Einfluß von Vielfachstreuprozessen kann durch eine Diffusionsgleichung beschrieben werden /22/. Sie hat die Form

$$\frac{\partial g(\psi, z)}{\partial z} = \frac{1}{\psi} \frac{\partial}{\partial \psi} \left[\psi D(\psi) \frac{\partial g(\psi, z)}{\partial \psi} \right] \quad (5.2.3)$$

$g(\psi, z)$ ist die Zahl der Teilchen, die in der Tiefe z einen Winkel zwischen ψ und $\psi + d\psi$ zur Reihe haben. ψ ist am Ort r_0 zwischen den Atomreihen zu nehmen. $D(\psi)$ der Diffusionskoeffizient stellt sich als Summe $D_e(\psi) + D_n(\psi)$ dar, wobei gewöhnlich der nukleare Term die Winkelabhängigkeit trägt.

Die Eintrittsverteilung $g(\psi, 0)$ hat in unserem Fall die Form der Gleichung (5.1.18). Als Randbedingung gilt $g(\psi, z) = 0$ für $\psi \rightarrow \infty$. Da $g(\psi, z)$ nach größeren Winkeln rasch abfällt, kann die Bedingung durch $g(\hat{\psi}, z) = 0$ ersetzt werden, wenn $\hat{\psi} > 2^\circ$.

Gleichung (5.2.3) wurde für einen Diffusionskoeffizienten gelöst, bei dem die Winkelabhängigkeit in einer groben Näherung wiedergegeben ist. Der Verlauf von $D(\psi)$ ist in Abb. 15 schematisch dargestellt. $D(\psi)$ hat im Bereich $\psi < \psi_G$ den konstanten Wert $D_e = \frac{1}{4} (\delta \Omega^2 / \delta z)_{ch}$ und für $\psi > \psi_G$ den Wert $D_n = \frac{1}{4} (\delta \Omega^2 / \delta z)_n$ (vergleiche Beziehung (5.2.2) und (5.2.1)). Der Übergang an der Stelle $\psi = \psi_G$ ist abrupt (eine Stufenfunktion) oder vollzieht sich mit konstanter Steigung in einem sehr engen Bereich von ψ . Die Steigung wird variiert und der Einfluß auf die Form der Verteilung geprüft.

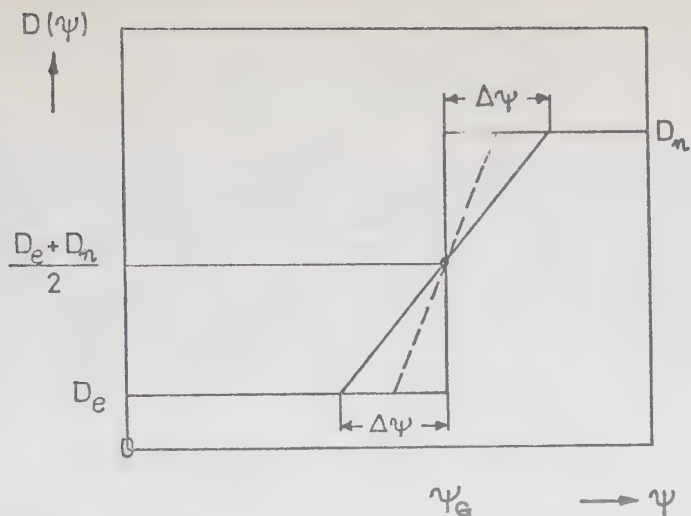


Abb.15 Diffusionskoeffizient als Funktion des Polarwinkels zur Lösung der Gleichung (5.2.3)

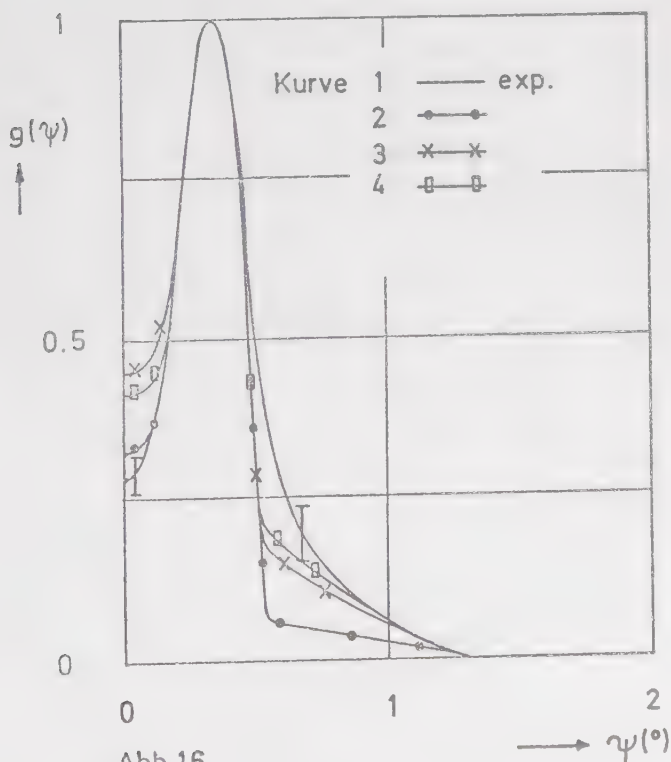


Abb.16

Vergleich berechneter Kurven
(siehe Abschnitt 5.2.2) mit der
Schnittverteilung aus Abb. 4

Für die Stufenfunktion kann man eine analytische Lösung angeben /26/. Sie wurde für $\psi_G = 0,48^\circ$ ausgewertet und ist in Abb. 16 als Kurve 2 bezeichnet.

Im Falle einer linearen Abhängigkeit um ψ_G wurde die Diffusionsgleichung numerisch mit Hilfe der Vorwärtsdifferenzen-Methode /27-30/ gelöst. Die Ergebnisse sind in den Kurven 3-4 angetragen. Der Parameter ist die Steigung $\Delta D / \Delta \psi$.

Bei Kurve 3 steigt der Diffusionskoeffizient im Bereich $\pm 0,05^\circ$ um ψ_G vom Wert D_e auf D_n an. Die Steigung beträgt $\frac{\Delta D}{\Delta \psi} = 6,5 \times 10^{-6} \left[\frac{1}{\text{\AA}} \right]$. Nach /1/ wird die Änderung der Querergergie $E \psi^2$ als Funktion des Diffusionskoeffizienten $D(\psi)$ durch folgende Beziehung beschrieben

$$\frac{\delta \langle E \psi^2 \rangle}{\delta z} = 4 E D(\psi) + 2 \psi E \frac{d D(\psi)}{d \psi} \quad (5.2.4)$$

Setzt man die hier verwendeten Werte bei $\psi = \psi_G$ ein, dann zeigt sich, daß der zweite Summand in (5.2.4), der die Querernergie-drift repräsentiert, den ersten Term (Diffusionsterm) um nahezu eine Größenordnung übertrifft. Die Verschiebung des Schwerpunktes der Verteilung beträgt etwa $1,6^\circ$ pro μm Eindringtiefe, gegenüber $0,4^\circ/\mu\text{m}$, die man nach der von Lindhard vorgeschlagenen Abschätzung erhält (siehe dazu /1,16/).

Für Kurve 4 ist die Steigung doppelt so groß wie bei Kurve 3. Der Anstieg erstreckt sich also über einen Winkelbereich von $\pm 0,02^\circ$ um ψ_G .

Ein Vergleich der Kurven zeigt, daß die nicht querernergieabhängige elektronische Vielfachstreuung die Form der Verteilung bei kleinen Winkeln gut bestimmt. Die Änderung des Diffusionskoeffizienten (des atomaren Anteils) mit der Querernergie wirkt sich hauptsächlich auf die Ausläufer aus und steuert damit den Fluß der Teilchen in den ungeführten Strahl. Allerdings findet sich auch ein Einfluß auf die Lage des Maximums, das mit stärkerer Steigung zu größeren Polarwinkeln wandert. Der Effekt liegt hier innerhalb der Zeichengenauigkeit und wird deshalb in der Darstel-

lung nicht sichtbar. Außerdem ändert sich die Zahl der in die Richtung der Atomreihe $\psi = 0$ gestreuten Teilchen.

Die Rotationssymmetrie und das Fehlen starker Ebenen in diesen Radialprofilen sollte das Aufstellen einer Teilchenbilanz möglich machen. Die Schnittverteilung $g(\psi, z = \text{const})$ wird bis $\psi = \psi_{kr}$ numerisch integriert. Das ergibt die Zahl der geführten Teilchen $T(\psi_{kr})$ zu

$$T(\psi_{kr}) \sim \int_0^{\psi_{kr}} 2\pi \psi g(\psi) d\psi \quad (5.2.5)$$

Dann findet man den Bruchteil der Projektile, die nach einer Tiefe von $\approx 2 \mu\text{m}$ in den ungeführten Strahl gestreut wurden (dechanneled) aus $[T_{\text{gesamt}} - T(\psi_{kr})] / T_{\text{gesamt}}$

Mit $T_{\text{gesamt}} = 6,7 \times 10^5$ ist dieser Anteil etwa 70-90 %.

6. Modellrechnung für die Azimutwinkelverteilung

Ausgehend von den Vorstellungen der Kontinuumsnäherung wird die Einstellung der azimutalen Winkelverteilung genauer untersucht. Es sollen vor allem die Verhältnisse im Übergangsbereich $\psi_{kr} < \psi < 2\psi_{kr}$ geprüft werden, wo die Annahme einer raschen Gleichverteilung auf der Querenergieschale nicht mehr gerechtfertigt ist.

Ein Maschinenprogramm simuliert die Streuverteilung, indem es die Bahnen - aus sukzessiven Einzelstreuungen gebildet - in einem Modellkristall verfolgt.

Aus den Rechnungen lassen sich Einsichten in die Bedeutung der Gitterebenen bei der Streuung um die Reihe gewinnen. Man findet schließlich, daß sich der Prozess durch eine Winkeldiffusion beschreiben läßt, wenn man für die Gebiete um die Gitterebenen und außerhalb einen unterschiedlichen Diffusionskoeffizienten einsetzt.

6.1 Simulation der Streuverteilung

6.1.1 Grundannahmen des Programms

Dem Programm liegen einige grundsätzliche vereinfachende Annahmen zu Grunde, die hier zusammengefasst und kommentiert seien.

Die Bahnen der Projektile verlaufen in einem Gitter von Atomreihen mit kubisch primitiver Struktur (Gitterparameter $a = 3,1 \text{ \AA}$). Berechnet wird nur die Projektion der Bewegung in die Querebene, die sich mit $E\psi^2 = \text{konst}$ vollzieht.

Die dreidimensionale Spur findet man durch Überlagerung einer Bewegung mit konstanter Vorwärtsgeschwindigkeit v_z .

Das Atomreihenpotential ist ein Lindhard'sches Standardpotential.

Die Streuung der Teilchen wird klassisch behandelt. Die Modifikation der Bohrschen Bedingung für die Transversalbewegung zeigt, daß dies für leichte Teilchen und Winkel von der Größe des kritischen Winkels gerechtfertigt ist [1].

Die Stöße mit den Reihen sind binär, d.h. ein Teilchen hat jeweils nur eine Wechselwirkung mit der Atomreihe zu der es den kleinsten Abstand hat. Da das Wechselwirkungspotential schnell abfällt, ist diese Annahme für Teilchen mit nicht zu kleiner Querenergie unkritisch. Für Projektile mit $\psi \ll \psi_{kr}$ werden die Ablenkungen mit Stoßparametern $l \approx d/2$ bedeutend und der Beitrag der anliegenden Ketten muß beachtet werden.

Der Energieverlust der Teilchen wird vernachlässigt. Die Projektile verlieren nur einen kleinen Teil $\lesssim 20\%$ ihrer Anfangsenergie. Das ändert den Streuwinkel um maximal 10% und den mittleren quadratischen Drehwinkel um $< 10\%$. Es ist deshalb zu erwarten, daß der Einfluß auf die Winkelverteilung gering ist. Für die Rechnungen verwendet man eine mittlere Energie, die ein Teilchen auf halber Strecke durch den Kristall hat.

Die thermische Bewegung der Atome in der Reihe wird nicht berücksichtigt, wenigstens nicht unmittelbar. Das macht die Wirkung einzelner Parameter leichter überschaubar, da die Bahnen eindeutig durch Querenergie und Eintrittsort definiert sind. Dadurch werden die Gittereffekte ungestörter hervortreten, was man beim Vergleich mit dem Experiment im Auge behalten muß.

Um die Gültigkeit des gemittelten Atomreihenpotentials zu sichern, dürfen Teilchen nicht näher als $r_{kr} \approx 0,07 \text{ \AA}$ an die Kette herankommen (siehe dazu Abschnitt 5.11.1). Durch die Wahl von $r_{kr} \approx 0$ werden auch die thermischen Schwingungen abgeschirmt. In der Simulation wird ein Projektil, das eine Wechselwirkung mit $l < l_{kr}(r_{kr})$ hat, aus dem Ring konstanter Querenergie herausgestreut. Es ist dann für die Winkelverteilung verloren.

6.1.2 Programmstruktur

Das Programm ist in ALGOL60 geschrieben und den Erfordernissen des Systems TR 440 angepasst. Es können etwa 400 Wechselwirkungen pro Sekunde gerechnet werden. In einem Programmlauf verfolgt man für festen Polarwinkel ψ die Bahnen von ungefähr 15000 Teilchen über eine Tiefe von 1 μm und gewinnt daraus eine Winkelverteilung. Die statistischen Fehler bleiben in vernünftigen Grenzen.

Im folgenden werden die Begriffe aus dem Programm (siehe Anhang) in Großbuchstaben geschrieben.

6.1.2.1 Eingabedaten

Bei der Transversalbewegung sind auch große Drehwinkel, im Prinzip bis $\varphi = \pi$ möglich, so daß die Anwendung der sogenannten Impulsnäherung bei der Bestimmung des Ablenkwinkels nicht in Frage kommt.

In einem getrennten Hilfsprogramm wird zunächst eine Tabelle erstellt, in der Streuwinkel φ und der Abstand kleinster Annäherung $r_{\min}$ als Funktion des Stoßparameters l mit der Reihe aufgelistet sind. Eine ad-hoc-Bestimmung der Größen in der Streuzelle würde zu viel Zeit kosten.

$r_{\min}$ erhält man aus Gleichung (5.1.1) mit Hilfe des Newtonschen-Iterationsverfahrens.

Zur Bestimmung des Streuwinkels wird im Stoßintegral (5.1.2) die Substitution nach Robinson /31/ $r = \frac{r_{\min}}{1-n^2}$ durchgeführt - die Integrationsgrenzen sind dann $n = 0$ und $n = 1$ - und dann nach dem von Burlisch-Stoer /32/ modifizierten Rombergverfahren /33/ integriert. Als Eingangsgröße des Hilfsprogramms tritt das Reihenpotential auf. Die Rechnung kann ohne Umstände auf andere Wechselwirkungspotentiale ausgedehnt werden.

Die Schrittweite im Stoßparameter wird so gewählt, daß der Streuwinkel von 180° in Schritten von $0,5^\circ$ bis etwa 5° vorliegt. Zwischenwerte werden im Hauptprogramm linear interpoliert.

Im Bereich $\varphi < 5^\circ$ wird die Impulsnäherung verwendet, in der sich $\varphi(1)$ darstellt wie

$$\varphi(1) = \frac{\pi}{2} \left\langle \frac{\psi_1}{\psi} \right\rangle^2 \left\{ 1 - \frac{1}{\left(1 + \frac{c^2 a^2}{l^2} \right)^{1/2}} \right\} \quad (6.1.1)$$

Beim Start des Hauptprogramms existiert also für eine bestimmte Querenenergie (bzw. Polarwinkel ψ) eine etikettierte Dateneinheit von Werten $1 - r_{\min} - \varphi$, die zunächst eingelesen wird. Außerdem legt man den Startwinkel φ_e (PHIO) auf dem Querenenergie-Ring, die Kristalldicke DICKEL und den kritischen Radius RCR fest, innerhalb dessen die Teilchen vom Ring abgestreut werden. Gewöhnlich fallen die Teilchen "parallel" auf den Modellkristall, d.h. $v(\varphi_e, 0) = 1$ im Winkelbereich $d\varphi = 1^\circ$. Das entspricht einer von ψ_e abhängigen Winkeldivergenz von ungefähr $0,02^\circ$.

Die Eintrittsorte sind entlang einer Kante der quadratischen Einheitszelle, in deren Mitte die Atomreihe liegt, gleich verteilt. Die Weite des Rasters ist durch die Zahl der eingeschossenen Teilchen TMAX als $DPO = TMAX/D$ bestimmt.

6.1.2.2 Streueinheit

Kern des Programms ist die Streueinheit (Zeile 1170 bis 1730), die immer wieder durchlaufen wird. Der Streuwinkel PHIS kann aus der relativen Lage zweier konzentrischer rechtwinkliger Koordinatensysteme ersehen werden. Das eine ist im Gitter verankert: die x und y Achse weisen in die Richtungen $\{100\}$ -artiger Ebenen. Das andere System dreht sich mit dem gestreuten Teilchen.

Nachdem bei NICHTSTREU diejenige Reihe gefunden ist, zu der ein Teilchen den kleinsten Stoßparameter PO hat, springt das Programm zu EINHZ und stellt fest, ob PO kleiner ist als der zu RCR gehörige Stoßparameter L [INDCR], worauf das Teilchen ausscheidet (VERLT). Liegt PO zwischen LCR und dem größten tabellierten Stoßparameter ABSCH, wird mit dem Unterprogramm SUCHE die Ablenkung DPHI aus der Tabelle entnommen. Für Stoßparameter, die größer sind als ABSCH berechnet man DPHI direkt in Impulsnäherung (Zeile 1210).

Der neue Wert von PHIS (Zeile 1540) wird auf einen Bereich von -180° bis $+180^\circ$ reduziert, die Zahl der durchlaufenen Einheitszellen ZE erhöht und der nächste Streuer gesucht. Ist der vorgeschriebene Weg in der Querebene DICKEQ durchlaufen, legt man den Austrittswinkel in der Verteilung VT [5] ab. Dann werden zwischen SCHLEIFE und ENDESCHL einige Daten verarbeitet, die den Pfad charakterisieren und bei Zeile 1110 das nächste Teilchen eingegeben.

6.1.2.3 Ergebnisse

6.1.2.3.1 Winkelverteilung

Ausgehend von einem diskreten Einschußpeak verfolgt das Programm die Entwicklung der differentiellen Winkelverteilung $v(\varphi, z)$ in Abhängigkeit von z . Nach jeder Wechselwirkung - in der Querebene ein Durchgang durch die Einheitszelle (Halbwelle) -, das entspricht einem Tiefenschritt $\Delta z \approx d/\psi_e \approx 200 \text{ \AA}$ werden die Teilchen in Bereiche mit $d\varphi = 1^\circ$ geordnet und in VTS (Zeile 1720) gespeichert. Man stellt fest, daß sich nach Eindringtiefen $z > 5000 \text{ \AA}$ Veränderungen im Spektrum sehr langsam vollziehen. Deshalb kann man die Statistik durch Mittelung über die letzten Tiefenintervalle vor dem Austritt verbessern. Nimmt man etwa 10 Halbwellen, dann ist die Übereinstimmung zwischen der Austrittsverteilung mit (Feld VTS5) und ohne Mittelung (Feld VT[5]) ausgezeichnet. Typische Ver-

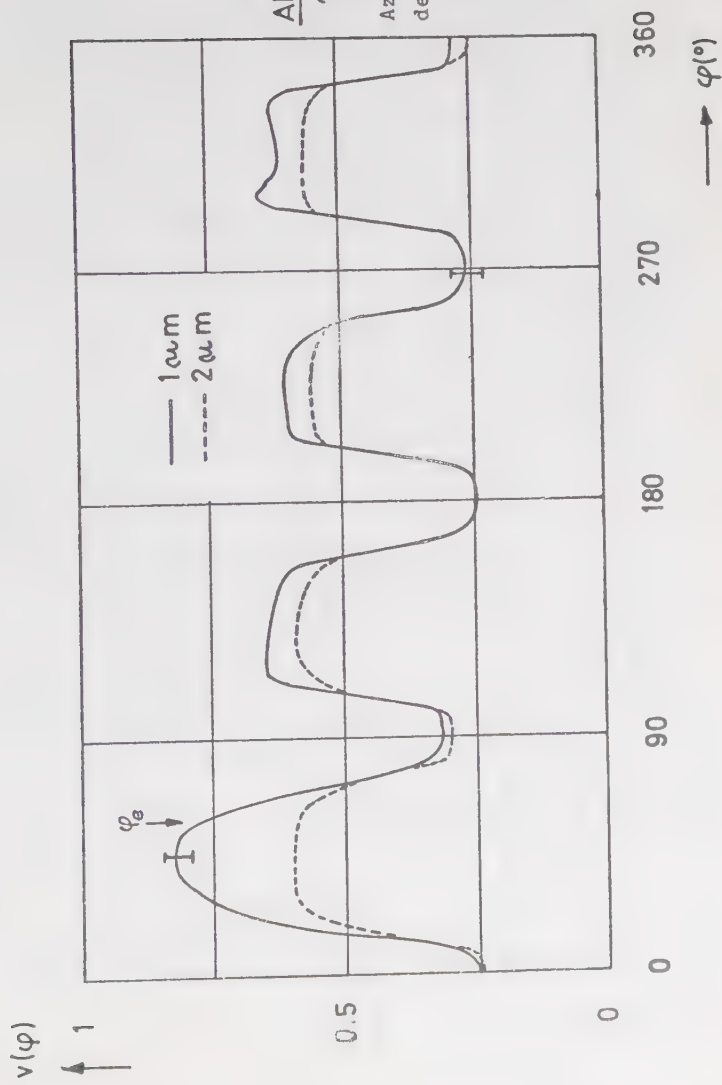


Abb.17
 $\psi_e = 0.4^\circ$

Azmutverteilungen aus
 der Simulation für $\psi_e = 0.4^\circ$

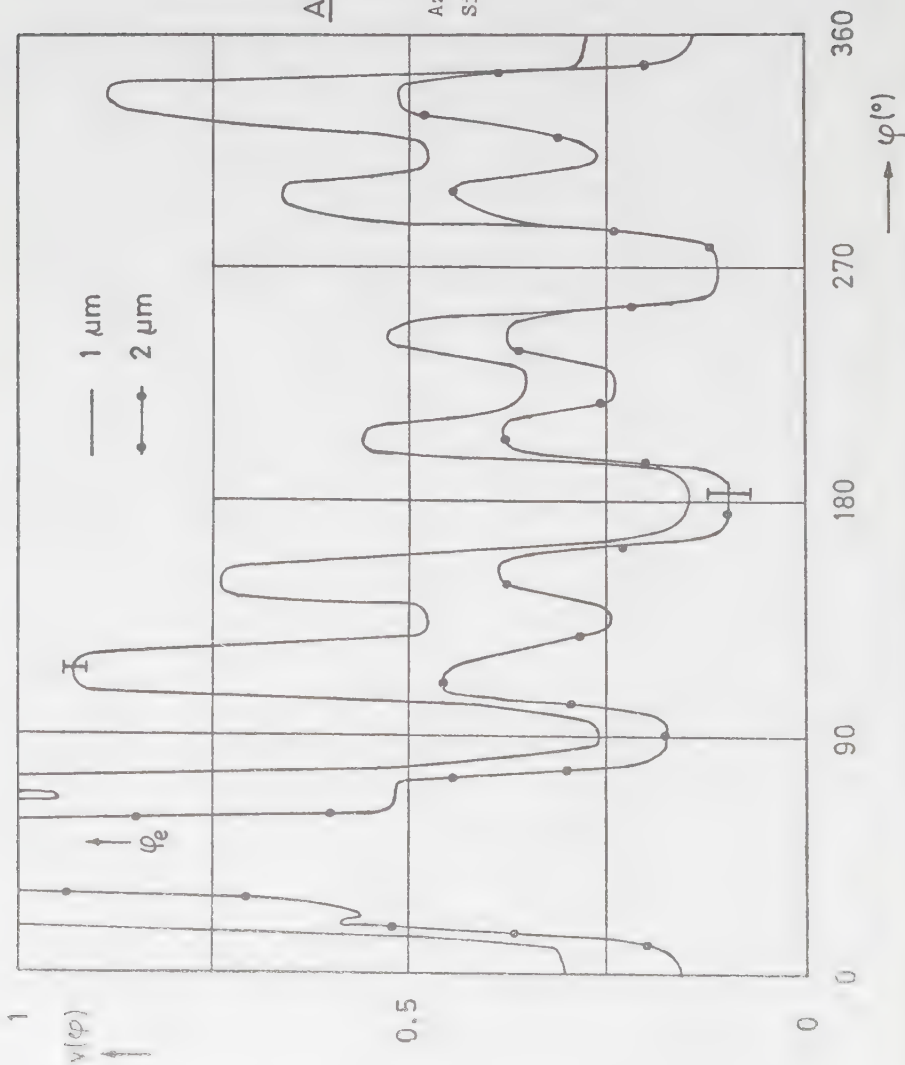


Abb.18a

$$\psi_e = 0.6^\circ$$

Azmutverteilungen aus der
Simulation für $\psi_e = 0.6^\circ$

teilungen $\psi(\psi_e)$ sind in Abb. 17, 18a, 19a für verschiedene Winkel ψ_e und Tiefen z dargestellt. Alle Kurven zeigen ausgeprägte Ebeneneffekte, die erst für $\psi_e < 0,4^\circ$ verschwinden.

Bei Einstrahlung parallel zu einer dichtgepackten Gitterebene beobachtet man den Wührungseffekt (siehe dazu Abschnitt 5.1.2.1). Die Teilchenbahnen verlaufen größtenteils zwischen einer Ebenenpaar, das vermindert die adäquate Streuwirkung erheblich und liefert schmale Austrittsverteilungen wie Abb. 20 zeigt.

6.1.2.3.2 Diffusionskoeffizienten

Die starken Ebeneneffekte lassen vermuten, daß die Streuung durch den Gitteranisotrop ist. Man unterscheidet deshalb die Streuung mit von $r_{\min}$ und Streuung $\Delta\varphi$ von der Streuung φ . Ein Projektil, das unter einem Winkel φ gegen die Atomreihe anläuft erleidet eine von 1 abhängige Streuung um $\Delta\varphi(1)$ und hat einen kleinsten Abstand $r_{\min}(1)$. Beide Informationen von der Vorzeichenverteilung zu werden. Wenn man $[\Delta\varphi(1)]^2$ - wertet in Funktion φ und 1916 statt φ in einem Text, das zum Winkelintervall φ durch $\Delta\varphi(1)$ ist φ - $\Delta\varphi(1)$. Außerdem tritt von φ im Text, das wird darauf hingewiesen, in diesem Winkelbereich vorgekommen ist.

Abb. 19a zeigt die Streuung in verschiedenen Ebenenpaaren. Man erkennt, daß die Streuung in einer Ebene φ φ (Zeile 1430), so daß keine Oberflächeneffekte - kein Einfluß der Einschussbedingungen - auftauchen.

Nach dem Austritt der Teilchen aus dem Kristall kann man über die Stoßparameter mitteln, das bedeutet

$$\overline{r_{\min}} [i] = \frac{R_{\min} [i]}{INH [i]} \quad \text{und} \quad \overline{\varphi^2} [i] = \frac{\Phi_{\text{HIQ}} [i]}{INH [i]} \quad (6.1.2)$$

für $i = 1, 2 \dots 360$ bilden.

Im Einklang mit den groben Vorstellungen (siehe Abschnitt 5.1.2.1) zum Blockierungseffekt der Ebenen ergibt sich, daß $r_{\min}$ im Bereich um $\varphi = 0^\circ, 90^\circ, 180^\circ, 270^\circ, \{100\}$ - Ebenen und $\varphi = 45^\circ, 125^\circ, 215^\circ, 305^\circ, \{110\}$ Ebenen um einen Faktor 5 kleiner ist als außerhalb der Ebenen. Der Schatteneffekt beruht auf einer Stoßparameterauswahl, die kleine 1 bevorzugt. Dementsprechend ist $\overline{\varphi^2}$ um die Gitterebenen etwa 4 mal so hoch wie in einer anderen Richtung. Es bietet sich also an, die Anisotropie durch einen richtungsabhängigen mittleren quadratischen Streuwinkel $\overline{\varphi^2}(\varphi)$ zu charakterisieren. Um überschaubare Verhältnisse zu erhalten, soll $\overline{\varphi^2}$ innerhalb des Schattenbereiches einer Ebene konstant sein. Die in Tabelle I mit $\langle \varphi^2 \rangle_{100}$ bzw. $\langle \varphi^2 \rangle_{110}$ und $\langle \varphi^2 \rangle_{\text{rand}}$ bezeichneten Größen sind Mittelwerte (Zeile 2660-2810) über das Intervall $\pm \varphi_s$ (EBHB) um die Gitterebenen bzw. über den außerhalb verbleibenden Bereich. φ_s für $\{100\}$ und $\{110\}$ ist den Modellverteilungen entnommen. Neben den mittleren Streuwinkeln sind die Diffusionskoeffizienten D_{100} , D_{110} und D_{rand} angegeben (siehe dazu Gleichung (5.1.11)).

Die Methode zur Bestimmung von $\overline{\varphi^2}(\varphi)$ wie sie oben beschrieben wurde, ist etwas ungewöhnlich, da die Ablenkungen $(\Delta\varphi)^2$, die zum Winkel φ_i gehören von verschiedenen Teilchen erlebt wurden. Bei einem linearen random-walk-Problem startet ein Teilchen mit φ_e und 1, wird um Winkel $\Delta\varphi_i$ gestreut und tritt schließlich mit φ_{ex} aus. Dann gilt $\overline{\varphi^2}(\varphi_e, \varphi) = \overline{(\varphi_{\text{ex}} - \varphi_e)^2} = \frac{(\sum \Delta\varphi_i)^2}{n} = \frac{\sum (\Delta\varphi_i)^2}{n}$
 n Zahl der Streuevents. Betrachtet man Projektile mit allen möglichen φ_e , dann über die Stoßparameter gemittelt werden $\overline{\varphi^2}(\varphi_e)$, wobei jedoch die "Geschichte" eines jeden einzelnen Teilchens erhalten geblieben ist.

Im Programm wird dieser Weg ebenfalls verfolgt (Zeile 1770 - 2280) und dabei unterschieden, ob die Wechselwirkung im Ebenenbereich oder außerhalb stattfindet. Beide Methoden führen innerhalb des statistischen Fehlers zu den gleichen Ergebnissen.

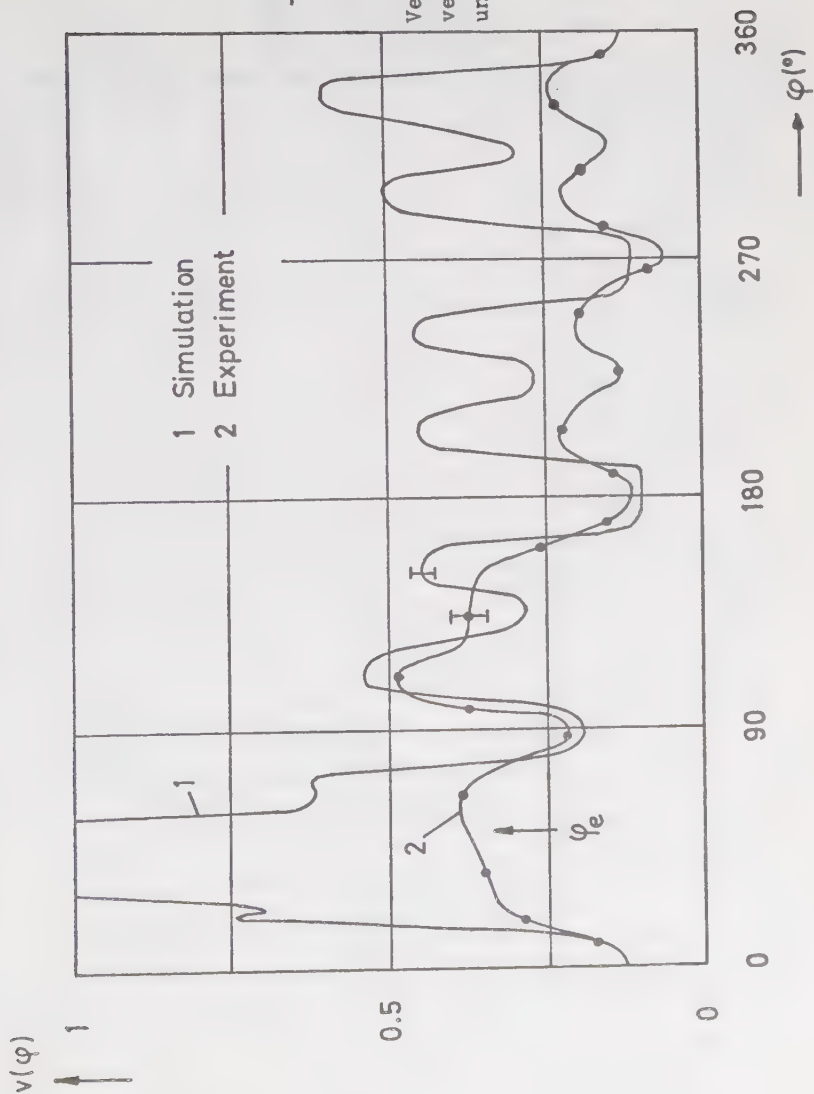


Abb.18 b

$$\psi_e = 0.6^{\circ}$$

Vergleich von Azimutwinkel-
verteilungen aus Experiment
und Simulation für $\psi_e = 0,6^{\circ}$

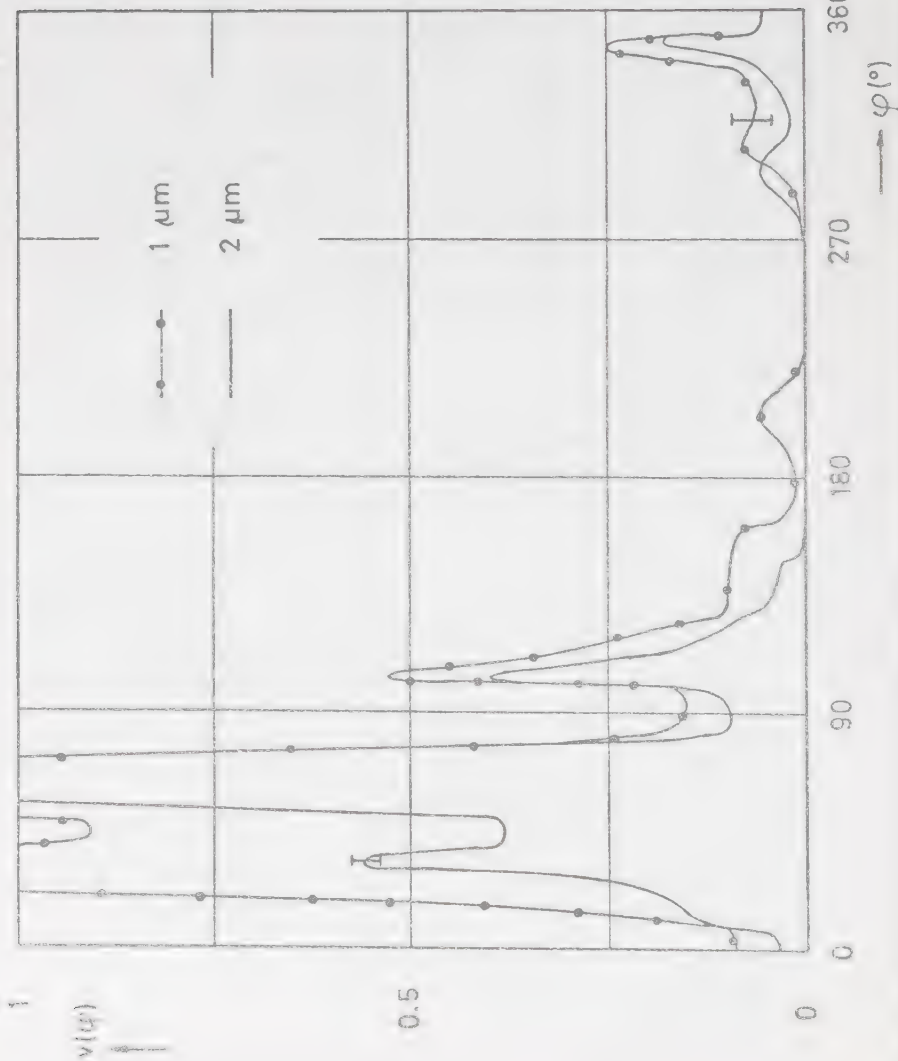


Abb.19a

$$\psi_e = 0.8^\circ$$

Azimutwinkelverteilungen aus
der Simulation für $\psi_e = 0,8^\circ$

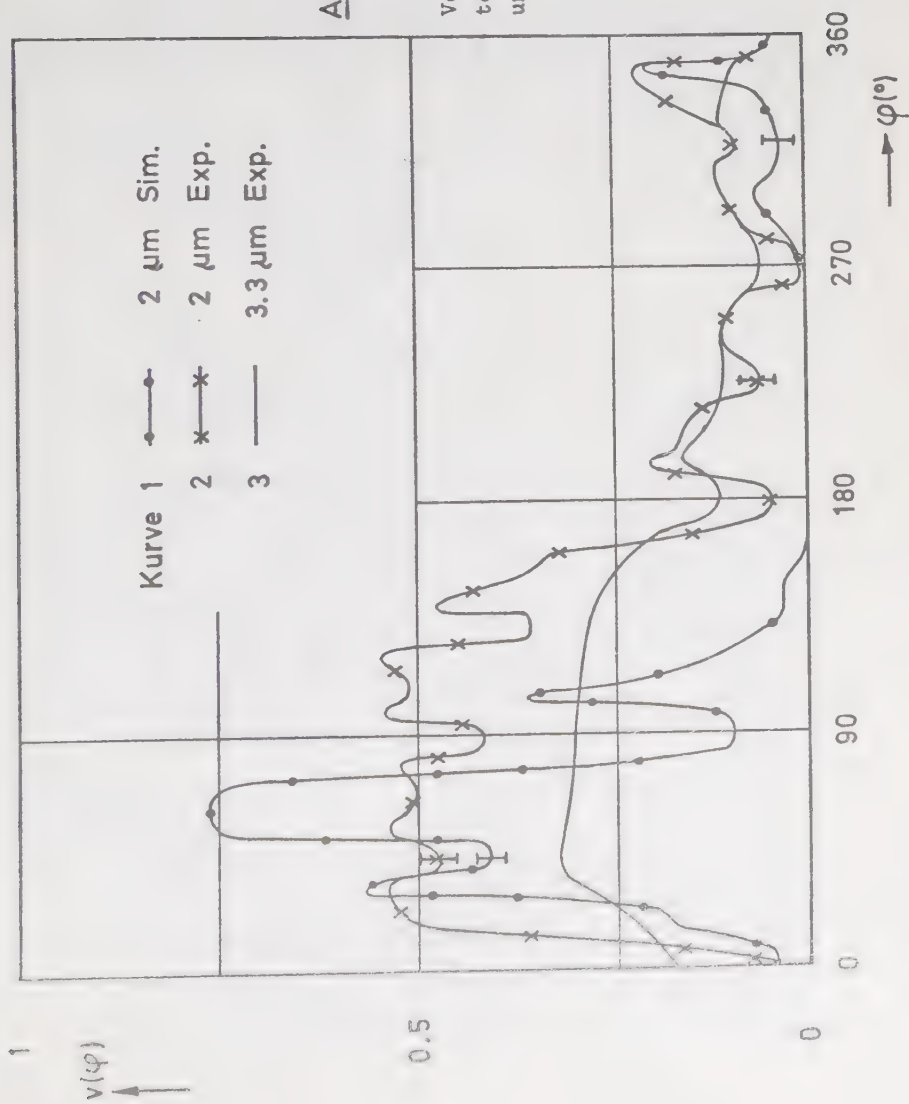


Abb.19 b -

$$\gamma_e = 0.8^{\circ}$$

Vergleich von Azimutver-
 teilungen aus Experiment
 und Simulation für $\gamma_e = 0,8^{\circ}$

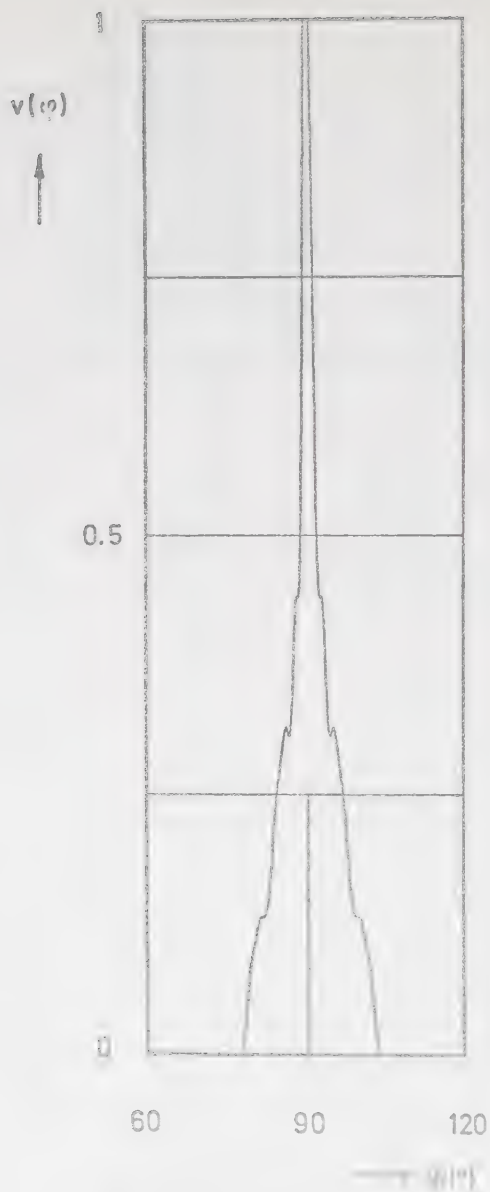


Abb. 20

$\varphi_e = 90^\circ$

Azimutwinkelverteilung aus der Simulation
bei Einschub in eine $\{100\}$ -Ebene
(Kristalldicke $1,2 \mu\text{m}$, $\psi_e = 1,2^\circ$)

6.1.2.3.3 Leckrate

Bei einem Stoßparameter $1 < 1_{kr}$ (L [INDCR]) scheidet ein Teilchen von Kreis $\psi_e = \text{konst}$ aus. Das Programm registriert die Eindringtiefe (ZE) und den Azimutwinkel (Gitterrichtung) φ_v in Feld TVT (Zeile 1270) und VTV (Zeile 2030). Damit lässt sich die Abnahme der Teilchenzahl als Funktion von z darstellen (Zeile 2340). Man erhält ein Exponentialgesetz:
 $v(\varphi, z) = v(\varphi, 0) e^{-z/\lambda_v}$ mit einer mittleren freien Weglänge λ_v .

Die Wahrscheinlichkeit für den Verlust des Teilchens vom Ring ist proportional zum Wirkungsquerschnitt $\sigma_v = 2 \cdot 1_{kr}(\psi)$.
 Aus Gleichung (5.1.1) erhält man

$$\sigma_v(\psi) = 2r_{kr} \sqrt{1 - \left(\frac{\psi_{kr}}{\psi}\right)^2} \quad (6.1.3)$$

und schließlich

$$\lambda_v = \frac{1}{Nd \sigma_v(\psi) \cdot \psi} \quad (6.1.4)$$

Hier ist Nd die Dichte der Streuer in der Querebene und ψ_{kr} aus (5.1.1) mit $l=0$ zu entnehmen.

In Tabelle II sind Werte von σ_v und λ_v für $r_{kr} = 0,07 \text{ \AA}$ aufgetragen. Eine Abhängigkeit der Leckrate von der Gitterrichtung (aus Feld VTV), vor allem ein Unterschied zwischen Ebenen und Winkelbereichen außerhalb, kann nicht festgestellt werden. Der Verlustquerschnitt ist demnach eine Konstante im Azimutwinkel und nur eine Funktion der Querergergie.

6.1.3 Programmtests

Das Programm kann relativ leicht auf Fehler geprüft werden, da es keine rein statistischen Elemente (thermische Bewegung) enthält und der Weg im Gitter geometrisch genau definiert ist.

Die Bahnen einiger Teilchen mit verschiedenem φ_e und l wurden unabhängig vom Programm per Hand gerechnet und auf Millimeter-Papier gezeichnet. Dieselben Projektile verfolgt man in allen Details im Programm und vergleicht die Ergebnisse.

Außerdem kann die Gittersymmetrie genutzt werden. Bei Einschluß parallel zu einer $\{100\}$ oder $\{110\}$ Ebene muß sich exakte links - rechts Symmetrie zeigen. Das wurde für einige Bahnen mit gleichem Stoßparameter und für die gesamte Winkelverteilung geprüft.

Die Teilchenbahnen müssen umkehrbar sein. Damit wird die Routine (Zeile 1610) getestet, die den Verlauf des Streuweges festlegt.

6.2 Diffusionsgleichung für die Azimutverteilung

Nach den Erkenntnissen aus den Simulationen muß das Diffusionsproblem in Abschnitt 5.1.1.2 modifiziert werden. Der Diffusionskoeffizient wird eine Funktion des Azimutwinkels und spiegelt die Gitterstruktur wieder.

Es gibt eine gewisse Wahrscheinlichkeit dafür, daß ein Teilchen, das auf dem Kreis $|\vec{p}_{\perp e}| = \text{konst}$ startet zu höheren Querimpulsen befördert wird und damit für den Diffusionsprozess verlorengeht. Die Diffusionsgleichung für $\psi = \text{konst}$ lautet also /20/

$$\frac{\partial v}{\partial z}(\varphi, z) = \frac{\partial}{\partial \varphi} \left[D_{\text{rot}}(\varphi) \frac{\partial v}{\partial \varphi}(\varphi, z) \right] - \frac{1}{\lambda_v} v(\varphi, z) \quad (6.2.1)$$

im Bereich $-\pi < \varphi < +\pi$

oder mit

$$v(\varphi, z) = u(\varphi, z) e^{-z/\lambda_v} \quad (6.2.2)$$

$$-\frac{\partial u(\varphi, z)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial \varphi} \left[D_{\text{rot}}(\varphi) \frac{\partial u}{\partial \varphi}(\varphi, z) \right] \quad (6.2.3)$$

$v(\varphi, z)$ ist die differentielle Verteilung in der Tiefe z ,
 $D_{\text{rot}}(\varphi)$ der bereichsweise konstante Diffusionskoeffizient,

$$D_{\text{rot}}(\varphi) = \begin{cases} D_{100} & \text{in der Nähe der } \{100\} \text{ Ebenen} \\ D_{110} & \text{in der Nähe der } \{110\} \text{ Ebenen} \\ D_{\text{rand}} & \text{in "random"-Bereichen} \end{cases}$$

D_{100} , D_{110} , D_{rand} sind Konstanten, die aus den Maschinenrechnungen entnommen werden.

Als Anfangsbedingung wählt man eine schmale Verteilung um φ_e .
 Der Einschuss erfolgt beim Modell stets außerhalb von Ebenen
 in random-Bereichen.

Die Lösung ist bei $\varphi = \pi$ zu verknüpfen mit

$$u(-\pi, z) = u(\pi, z) ; \quad \left. \frac{\partial u}{\partial \varphi} \right|_{\pi} = \left. \frac{\partial u}{\partial \varphi} \right|_{-\pi} \quad (6.2.4)$$

Schließlich sind die Bedingungsgleichungen für den Übergang zwischen einem Medium mit Diffusionskoeffizienten D_1 und Teilchendichte u_1 und einem anderen mit D_2 und u_2 aufzustellen. Für den Teilchenfluß an der Grenzfläche $\varphi = \varphi_G$ ist zu fordern

$$D_1 \frac{\partial u_1}{\partial \varphi} = D_2 \frac{\partial u_2}{\partial \varphi} \quad \varphi = \varphi_G \quad (6.2.5)$$

Das besagt, daß sich in der Trennfläche keine Teilchen ansammeln dürfen.

Die zweite Bedingung bezieht sich auf die Teilchendichte. Sie ergibt sich aus den physikalischen Gegebenheiten.

Im statistischen Bild der Diffusion, siehe etwa [14], ist der Fluß von Bereich 1 nach 2, $\frac{1}{2} u_1 \delta \varphi_1 \Gamma_1$, wenn u_1 die Teilchendichte bei φ_G , $\delta \varphi_1 = \sqrt{K \varphi^2}$ die Sprungweite und $\Gamma_1 = \frac{1}{\tau_0}$ die Sprunghäufigkeit. Dasselbe gilt für den Bereich 2, so daß der Nettofluß aus 1 nach 2 gegeben ist durch

$$\frac{1}{2} (u_1 \delta \varphi_1 \Gamma_1 - u_2 \delta \varphi_2 \Gamma_2) = -D_1 \frac{\partial u_1}{\partial \varphi} \quad (6.2.6a)$$

$\psi(^{\circ})$	0,6	0,8	1,0
$\sigma_v(\text{\AA})$	0,023	0,094	0,113
$\lambda_v(\mu\text{m})$	1,8	0,3	0,2

Tabelle II : Wirkungsquerschnitt und mittlere freie Weglänge für die Verletzung der Querenergieerhaltung

$\psi(^{\circ})$	0,6	0,8	1,0
Experiment	10	9	7,5
$\varphi_s(^{\circ})$ Modell	16	14	-
{100} Theorie	22	17	13
Experiment	7	6	6
$\varphi_s(^{\circ})$ Modell	10,5	9	-
{110} Theorie	18	14	11

Tabelle III : Schattenwinkel in Grad für {100} - und {110} -Ebenen als Funktion des Polarwinkels

Wegen $D_1 = \frac{\langle \varphi^2 \rangle_1}{2 z_0}$ bzw. $D_2 = \frac{\langle \varphi^2 \rangle_2}{2 z_0}$ und $\Gamma_1 = \Gamma_2$ findet man für die Teilchendichte in der Grenzfläche die Bedingung:

$$\sqrt{\frac{1}{2z_0}} \cdot (\sqrt{D_1} u_1 - \sqrt{D_2} u_2) = -D_1 \frac{\partial u_1}{\partial \varphi} = -D_2 \frac{\partial u_2}{\partial \varphi} \quad \varphi = \varphi_e \quad (6.2.6b)$$

Die Gleichungen (6.2.3 - 6.2.6) lassen sich grundsätzlich analytisch lösen, jedoch macht die Bestimmung der freien Konstanten aus den Übergangsbedingungen, die zeitlich veränderliche Größen miteinander verbinden, erhebliche Schwierigkeiten /35/. Deshalb wurde auf ein numerisches Verfahren, die Methode endlicher Differenzen (Vorwärtsdifferenzenmethode) zurückgegriffen.

Der gesamte Winkelbereich wird gemäß der vierzähligen Symmetrie in Bereiche aufgeteilt: vier, die $\{100\}$ Ebenen repräsentieren bei $\varphi = -90^\circ, 0^\circ, 90^\circ, 180^\circ$; vier, die $\{110\}$ Ebenen darstellen bei $\varphi = -135^\circ, -45^\circ, 45^\circ, 135^\circ$. Die Breite der Bereiche wird von Experiment und Modellrechnung bezogen. Die verbleibenden Winkelintervalle sind random Zonen.

Die Schrittweite im Winkel ist $\Delta\varphi = 1^\circ$. Dann ist die Größe der Tiefenintervalle Δz durch die Stabilitätsbedingung $D_{\text{rot}} \cdot \frac{\Delta\varphi}{(\Delta z)^2} < 1/2$ vorgegeben /27/. Für D_{rot} ist der größte Wert D_{100} einzusetzen, was ein Δz von etwa 5 Gitterabständen ergibt.

Bei der Umschreibung der Übergangsbedingungen in Differenzengleichungen wurde das von Eyres, Hartree et al. /29/ vorgeschlagene Verfahren angewendet. Da eine diskontinuierliche Anfangsverteilung in numerischen Rechnungen Schwierigkeiten bereitet, startet man das Programm an einem Punkt $\hat{z}$ mit

$$u(\varphi, \hat{z}) = \frac{1}{2\sqrt{\pi D_{\text{rot}} \hat{z}}} \exp(-(\varphi - \varphi_e)^2 / 4 D_{\text{rot}} \hat{z}) \quad (6.2.7)$$

als Einschußverteilung.

$\hat{z}$ ist so klein zu wählen, daß in die anliegenden Winkelbereiche (Ebenen) noch keine nennenswerte Teilchenzahl eingestreut wurde.

$v(\varphi)$ 1
↑

Abb.21
Azimutwinkelverteilung
nach der Modellrechnung
(Abschnitt 6.2)
für $\psi_e = 0,8^\circ$

0.5

0

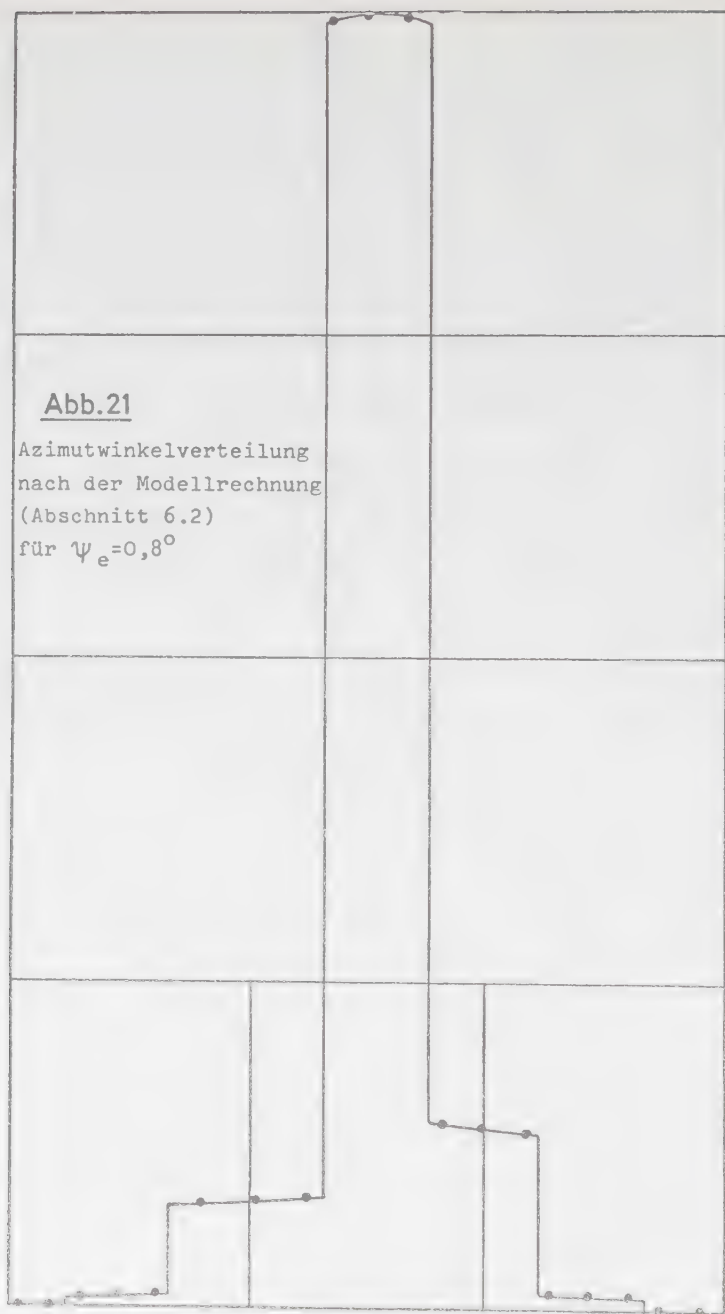
-45

0

45

90

→ $\varphi(^{\circ})$



Die Verteilung in Abb. 21 ist für $\psi_e = 0,8^\circ$, $\varphi_e = 20^\circ$ und eine Kristalldicke von $1,5 \mu\text{m}$ gerechnet. Die Kurve zeigt die erwartete Ebenenstruktur in groben Zügen. Jedoch ergibt sich beim Übergang vom Ebenenbereich zur random-Zone ($\varphi = -15^\circ, +55^\circ$) kein Anstieg der Intensität, wie in Experiment und Simulation. Das ist auf den Verlauf des Diffusionskoeffizienten zurückzuführen, der sich an diesen Stellen sprunghaft ändert. Wählt man eine stetige Funktion, z.B. einen linearen Übergang, tritt auch eine Erhöhung der Teilchendichte an den Ebenenrändern auf.

7. Vergleich der Messkurven mit dem Modell

In diesem Abschnitt sollen azimutale Streuprofile aus den Modellrechnungen mit experimentellen Kurven verglichen werden. Dazu werden die Parameter des Experiments, Einschußort (ψ_e, φ_e) und Divergenz in die Simulation so weit wie möglich übertragen. In den Abb. 18b, 19b sind experimentelle Kurven für eine $2\text{ }\mu\text{m}$ und eine $3,3\text{ }\mu\text{m}$ dicke Probe und berechnete Verteilungen bei verschiedenen Polarwinkeln einander gegenübergestellt.

Die Ordinate der Kurven zeigt die Teilchendichte in willkürlichen Einheiten. Die Kurven von Simulation und Experiment sind auf einen gemeinsamen Punkt normiert, der im Minimum der $\{100\}$ -Ebenen liegt. Der Vergleich bezieht sich also auf die Form der Verteilungen und nicht auf die absolute Intensität.

Eine überschlägige Beurteilung ergibt dieselbe ausgeprägte Abhängigkeit des mittleren Streuwinkels vom Polarwinkel und von der Gitterrichtung (Ebenenstruktur).

7.1 Querenergieabhängigkeit

Für verschiedene Polarwinkel bestimmt das Zusammenwirken der azimutalen Streuwirkung des Kettenpotentials und der atomaren (in geringem Maße auch elektronischen) Vielfachstreuung das Aussehen der Ringe.

Bei kleinen Polarwinkeln (Abb. 10, Kurve 4; Abb. 17) gilt $\lambda_{\text{rot}} < \lambda_v$. Die Projektile werden nach geringer Eindringtiefe auf dem Kreis gleichverteilt. Dann erweitert sich die Verteilung und die Teilchen fließen entlang der ganzen Peripherie durch querenergieändernde Prozesse vor allem nach außen ab.

Für $\psi_e > \psi_{\text{kr}}$ überwiegt die Vielfachstreuung $\lambda_v < \lambda_{\text{rot}}$. Die Profile bleiben um den Einschußort konzentriert und verbreitern sich dort nach innen und außen. Eine Drehung um große Winkel bis $\varphi \approx 180^\circ$ zu der dem Einschuß gegenüberliegenden Seite ist bei dünnen Kristallen nicht möglich. Teilchen, die dorthin ge-

langen müssen zuerst zu kleineren Querenergien gestreut werden. Sie sind deshalb stets an der Grenze des Schattenbereiches der Kette zu finden.

7.2. Ebenenstruktur

Der starke Einfluß der Gitterebenen auf die azimutale Streuung macht die Figuren komplex und erschwert die Diskussion beträchtlich. Trotz experimenteller Vorsorge trifft in vielen Fällen ein Teil des Strahls in eine Ebene, wird vom Gitterführungs-effekt dort gehalten und steht für den Drehprozess praktisch nicht zur Verfügung. Außerdem gelangen Teilchen - vor allem bei kleinem Drehwinkel in der Einzelstreuung - in den Bereich des Ebenenrandes $\varphi \approx \varphi_s$, wo sie wie die Modellrechnung zeigt, besonders stabile Bahnen durchlaufen (D_{rot} klein) und sich lange aufhalten (Abb. 10, Kurve 1).

Für Teilchen, die außerhalb der Ebenen einfallen, erhöht sich die Drehwirkung der Kette durch den hohen Diffusionskoeffizienten im Ebenenbereich.

Mit wachsendem Polarwinkel wird das Verhältnis des mittleren quadratischen Streuwinkels für die Gitterebenen zu dem im random-Bereich größer. Das bedeutet, daß die Teilchen stärker aus den Ebenen verdrängt werden und diese deutlicher hervortreten.

Bei kleinerem ψ_e füllen sich die Ebenen auf und verschwinden schließlich. Im Modell passiert das für die schwächeren $\{110\}$ -Ebenen schon bei $\psi_e = 0,4^\circ$. Die $\{100\}$ -Ebenen sind für $\psi_e = 0,2^\circ$ noch schwach zu erkennen. Das Experiment zeigt bei $\psi_e = 0,4^\circ$ keine Ebenen mehr.

Schattenwinkel der $\{100\}$ - und $\{110\}$ -Ebenen sind in Tabelle III gesammelt. Die mit "Modell" und "Experiment" bezeichneten Winkel wurden aus der halben Breite der Ebenenminima in halber Tiefe gewonnen. Die theoretischen Werte sind für ein gemittelltes Ebenenpotential nach /1/ berechnet. Nach der Theorie ist der Schattenwinkel empfindlich von ψ abhängig, was hier nicht gefunden wurde.

8. Diskussion und Ergebnisse

In einkristallinen Proben mit einer Dicke $< \lambda_v(\psi_e)$ wird der Einfluß des Kristallpotentials auf die Streuverteilung der durchgehenden Projektile nur wenig von Vielfachstreuungseffekten überdeckt. Aus der Änderung der Streuprofile mit Polarwinkel und Probendicke ließ sich die Stärke der Vielfachstreuung und ihre Abhängigkeit von der Querenergie abschätzen, so daß in den Verteilungen dann Einzelheiten des Streumechanismus sichtbar wurden.

Bei $\psi_e < \psi_{kr}$ beschreibt das Kontinuumsbild der Atomreihe die Verteilungen gut, wenn der radialen Verbreiterung Rechnung getragen wird, die in diesem Winkelbereich hauptsächlich von der Aufstreuung des Strahls an den Kristallelektronen hervorgerufen wird. Wegen der geringen mittleren freien Weglänge für die azimutale Gleichverteilung $\lambda_{rot} \approx 2000 \text{ \AA}$ wird für Proben, die dicker als $0,5 \mu\text{m}$ sind eine ringförmige Verteilung um die Richtung der Kristallachse erhalten. Bei dickeren Proben kommt ein größerer Teil des Strahls in den Wirkungsbereich der nuklearen Vielfachstreuung, die bei $\psi \approx \psi_{kr}$ einsetzt. Das führt zu dem raschen Anwachsen der Querenergie. Es entwickeln sich starke Ausläufer um ψ_{kr} .

Armstrong, Gibson et al. /2/ erhalten dagegen für einen $1,14 \mu\text{m}$ dicken Silizium-Einkristall und 4-MeV-Protonen bei der Transmission noch ein deutliches Maximum um den Einschußort und eine Abnahme der Intensität zu größeren Azimutwinkeln. Obwohl alle Verteilungen für $\psi_e < \psi_1 \approx \psi_{kr}$ aufgenommen wurden und für diese Annahme $\lambda_{rot} \approx 3000 \text{ \AA}$, wurde keine Gleichverteilung beobachtet. Das ließe sich allerdings dann erklären, wenn der Strahl im Experiment parallel zu einer niedrigindizierten Ebene einfiel.

Experimente von Lottner /4/ an Silizium mit 4-MeV-Alpha-Teilchen zeigen, daß tatsächlich bei einer Dicke von $4000\text{-}5000 \text{ \AA}$ ein gleichverteilter Ring erreicht wird. Zugleich wird die

radiale Verbreiterung sehr gering, so daß die Verteilungen maßgeblich durch die Divergenz des einfallenden Strahls bestimmt sind.

Die Gitterebenen zeigen für kleine Polarwinkel nur einen geringen Einfluß auf die azimutale Streuung, sofern der Strahl nicht parallel zu einer Ebene einfällt. Für $\psi \ll \psi_{kr}$ behindert auch das die azimutale Verteilung nicht, da dann im Streuprozess das Potential jeder einzelnen Atomreihe deutlich getrennt wirkt und daher die Ebenenstruktur der hintereinanderliegenden Reihen sich nicht bemerkbar machen kann.

Die Verbreiterung der Querergergie durch einzelne oder vielfache atomare Streuprozesse während der Penetration von geladenen Projektilen in Kristallgittern (Dechanneling) wurde bisher ausschließlich aus Rückstreuexperimenten über mehrere Annahmen gewonnen. In den hier beschriebenen Transmissionsexperimenten läßt sich wegen der Rotationssymmetrie der Streuprofile der Anteil dieser "dechanneled projectiles" unmittelbar gewinnen, indem man den Radialschnitt vermißt und die Intensität bis ψ_{kr} aufsummiert (siehe Abschnitt 5.2.2).

Im Bereich $\psi_e > \psi_{kr}$ machen sich Gitterebenen in der azimutalen Streuung bemerkbar. Fällt der Strahl in eine Ebene, dann hält das gemittelte Potential die Teilchen über große Tiefen ($\approx 10 \mu m$) gefangen; der azimutale Diffusionskoeffizient und die Vielfachstreuung sind drastisch reduziert, siehe Abschnitt 5.1.2.2.

Anderes verhält es sich, wenn die Teilchen außerhalb einer Ebene mit $\psi_e > \varphi_s$ starten. Dann erfahren sie im Winkelbereich um die Ebenen eine höhere azimutale Streuwirkung als in den anderen Bereichen; das erhöht den azimutalen Streuprozess um die Atomkette. Da jedoch der mittlere Drehwinkel mit wachsender Querergergie abnimmt, ist selbst bei dickeren Proben keine Gleichverteilung um die Richtung der Reihe zu erwarten.

Die Wahrscheinlichkeit quatergergieändernder Streuprozesse nimmt mit wachsendem Polarwinkel ebenfalls zu, weshalb sich das Streuprofil um den Einfallspunkt stark verbreitert. Das Ringprofil

entsprechend einer Einfallsquenergie um $E\psi_e^2$ verliert mit zunehmender Eindringtiefe Teilchen durch Streuung vor allem nach größeren Polarwinkeln. Der Wirkungsquerschnitt σ_v für den Verlust ist quenergieabhängig $\sigma_v \sim \sqrt{1 - (\psi_{kr}/\psi)^2}$. Das bedingt eine Abnahme der Teilchenzahl einer gegebenen Quenergie $E\psi_e^2$ proportional zu $\exp(-z/\lambda_v)$ mit λ_v aus Gleichung (6.1.4). Bei $\psi_e = 0,8^\circ$ sind nach einer Tiefe von $\approx 4000 \text{ \AA}$ nur noch 30% der Teilchen auf dem ursprünglichen Ring konzentriert.

Dabei wird vorausgesetzt, daß die einmal von ψ_e weggestreuten Projektile nicht wieder über Mehrfachstreuung zu ψ_e zurückkehren. Das entspricht auch der sogenannten steady increase-approximation /22/ der dechanneling-Theorie, d.h. einem stetigen Anwachsen der Quenergie einer schmalen Einschußverteilung, hervorgerufen durch die starke Quenergieabhängigkeit des Diffusionskoeffizienten im Quenergieraum.

Die Analyse der Verteilungen durch Modellberechnungen ließ noch folgende Probleme offen:

1. Der Einfluß der Gitterebenen auf die azimutale Streuung wird in der Grobstruktur zufriedenstellend durch das Modell (Abschnitt 6) beschrieben; die atomare Vielfachstreuung ließ sich in diesem Modell jedoch nur unzulänglich berücksichtigen. Die Größe des kritischen Abstandes r_{kr} für die Quenergieerhaltung beeinflußt die Verlustrate sehr empfindlich (siehe Gleichung (6.1.3)). r_{kr} ist eine Funktion der Temperatur und auch vom Wechselwirkungspotential abhängig. Der Wert von r_{kr} kann bisher nur annähernd aus einfachen Modellen oder Maschinenrechnungen gewonnen werden.

2. Es mußte angenommen werden, daß ein Teilchen das näher als r_{kr} an die Kette herantritt eine große Quenergieänderung erfährt und damit die Wahrscheinlichkeit auf den Ring zurückkehren vernachlässigbar ist. Das wird im Übergangsbereich $\psi \sim \psi_{kr}$ nicht zutreffen, weil hier Quenergie diffusion und Quenergie drift gleichbedeutend am Verbreiterungsprozess mitwirken.

3. Dem Modell kann nicht entnommen werden zu welchem Polarwinkel ein Teilchen gestreut wird. Man erhält deshalb in der Modellrechnung keine zweidimensionalen Profile als Funktion der beiden Winkel φ und ψ . Als Ausweg wäre bei $\psi_e < \psi_{kr}$ die Lösung der Diffusionsgleichung mit querenenergieabhängigem Diffusionskoeffizienten $D(\psi)$ möglich. Aus der Form der Radialschnitte ließen sich dann Rückschlüsse auf die Funktion $D(\psi)$ ziehen.

Der Modellrechnung liegt das Lindhardsche Standardpotential für die Atomreihe zur Grunde. Es zeigt sich, daß eine Änderung der Abschirmlänge um $\approx 20\%$ und ebenso die Verwendung z.B. des Thomas-Fermi-Molière-Potentials keine merkbaren Unterschiede in die Azimutwinkelverteilungen bringt. Eine Auswahl zwischen mehreren "vernünftigen" Kristallpotentialen kann aus den Erkenntnissen dieser Experimente nicht getroffen werden. Es darf daraus gefolgert werden, daß auch für die hier vollzogene Diffusionsanalyse der azimutalen Streuverteilung Potentiale der Art der Thomas-Fermi statistischen Näherung adäquat sind.

9. Zusammenfassung

Die Arbeit berichtet über Transmissionsexperimente mit 4 MeV-Alpha-Teilchen an 1-3 μm dicken Magnesiumoxid-Einkristallen. Der einfallende Strahl hatte eine Winkeldivergenz $<0,1^\circ$; die durchgehenden Teilchen wurden photographisch registriert.

Es wurde die Entwicklung der azimutalen Streuverteilung um die $\langle 100 \rangle$ -Atomreihe in Abhängigkeit von der Querergerie $E\psi_e^2$ der Teilchen und der Kristalldicke untersucht.

Ausgehend von den Überlegungen der Kontinuumsnäherung für die Atomreihe läßt sich die azimutale Streuung durch ein Modell der Winkeldiffusion mit querergerieabhängigem Diffusionskoeffizienten beschreiben. Der mittlere Drehwinkel in der Einzelstreuung um die Reihe nimmt mit wachsendem Polarwinkel von $\sqrt{\langle \varphi^2 \rangle} \approx 70^\circ$ bei $\psi_e = 0,2^\circ$ bis 10° bei $\psi_e = 1,0^\circ$ ab.

Bei Proben von einigen Mikrometern Dicke bildet sich für $\psi_e < \psi_{kr}$ ein Ring gleichmäßiger Intensität um die Kristallachse aus, dessen volle Winkelöffnung $\approx 2\psi_e$ ist.

Für Polarwinkel $\psi_e > \psi_{kr}$ bewirken querergerieändernde Streuprozesse (atomare Vielfachstreuung) eine zunehmende Aufstreuung der Verteilungen um den Einschußort. Den Wirkungsquerschnitt für diese Prozesse findet man aus der Gültigkeitsbedingung für die Kontinuumsnäherung; er wächst mit dem Winkel ψ_e zur Atomreihe wie $\sqrt{1 - (\psi_{kr}/\psi_e)^2}$ an. Die Intensität auf dem Ring $\psi_e = \text{konst}$ nimmt demnach mit der Eindringtiefe exponentiell ab. Da auch der mittlere Drehwinkel kleiner wird, entsteht selbst bei dickeren Proben kein gleichmäßig belegter Ring mehr.

In diesem Querergeriebereich macht sich der Einfluß der Gitterebenen auf die azimutale Streuung bemerkbar. Durch einen Blockierungseffekt erfahren die Teilchen um die Richtung der

Ebenen eine stärkere Streuwirkung als in den Gebieten außerhalb. Das läßt sich in einem Diffusionsmodell durch einen vom Azimutwinkel abhängigen Diffusionskoeffizienten berücksichtigen, der die Periodizität des Gitters enthält.

Die Rotationssymmetrie bei Einfallswinkeln $\psi_e < \psi_{kr}$ ermöglicht es die radiale Verbreiterung der Ringe durch eine Diffusionsgleichung für den Polarwinkel mit ψ -abhängigem Diffusionskoeffizienten wiederzugeben. Es zeigt sich, daß im Bereich kleiner Querenenergien die Verbreiterung vorwiegend durch Streuung der Projektile an den Kristallelektronen bewirkt wird.

Bei $\psi \approx \psi_{kr}$ setzt die Wirkung der empfindlich querenenergieabhängigen atomaren Vielfachstreuung ein. Aus der Form der Radialschnitte erhält man Auskunft über den Diffusionskoeffizienten als Funktion von ψ .

Herrn Prof.Dr.R.Sizmann danke ich für die Anregung zu dieser Arbeit, für die Unterstützung bei ihrer Durchführung und für viele wertvolle Diskussionen

Herrn Dipl.Phys.V.Lottner danke ich für die freundschaftliche Zusammenarbeit bei den Experimenten an der Bestrahlungsanlage und für Hinweise bei der Erstellung der Programme

Mein Dank gilt Herrn Dr.F.Schulz und Herrn Ing.H.Halder von der Gesellschaft für Strahlen- und Umweltforschung, Neuherberg bei München, die mich bei der Auswertung der Filme unterstützten

Schließlich sei auch all denen, die noch zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben, an dieser Stelle gedankt, vorallem Herrn H.Bradatsch und den Herrn der Werkstatt

Die umfangreichen Computerrechnungen wurden am Leibniz-Rechenzentrum der Bayerischen Akademie der Wissenschaften durchgeführt

Die Arbeit wurde gefördert im Programm "Nukleare Festkörperforschung" des Bundesministeriums für Forschung und Technologie

Symbolliste

a	Thomas-Fermi Abschirmradius
d	Abstand der Atome einer Reihe
d_s	Abstand der Atomreihen in der Ebene
d_p	Abstand zwischen Ebenen
$D_{\perp}, D_{\parallel}$	Diffusionskoeffizient, transversal und lateral für den Ebenenfall
$D(\psi)$	Diffusionskoeffizient der Vielfachstreuung in axialer Symmetrie
D_{rot}	Diffusionskoeffizient für die azimutale Streuung
E	kinetische Energie der Projektile
$E_{\perp}$	Transversalenergie der Projektile
$g(\psi, z)$	differentielle radiale Winkelverteilung
l	Stoßparameter mit der Atomreihe
m_e	Ruhmasse des Elektrons
M_1	Masse eines Projektils
M_2	Masse eines Targetatoms
$n_{\perp}(\emptyset)$	differentielle Winkelverteilung quer zur Ebene
$n_{\parallel}(\psi)$	differentielle Winkelverteilung längs der Ebene
r	Abstand von der Atomreihe in der Ebene senkrecht zur Symmetrieachse
r_{min}	kleinster Abstand bei einer Wechselwirkung mit der Atomreihe
r_c	kritischer Abstand für Querenenergieerhaltung bei einer starren Reihe
r_{kr}	kritischer Abstand für Querenenergieerhaltung bei Berücksichtigung der thermischen Auslenkung
r_o	Radius der ebenen Einheitszelle

T_D	Debyetemperatur
$U(r)$	Kontinuumspotential der Atomreihe
$v_{\perp}$	Transversalgeschwindigkeit der Projektile
$v(\varphi, z)$	differentielle Azimutwinkelverteilung
$Y(y)$	Kontinuumspotential der Ebene
y	Abstand von der Ebene
Z_1	Ladungszahl der Projektile
Z_2	Ladungszahl der Targetatome
$\varepsilon_{\perp}$	reduzierte Querergergie
λ_{rot}	mittlere freie Weglänge für die azimutale Gleichverteilung
λ_v	mittlere freie Weglänge für die Verletzung der Querergergieerhaltung
q	thermische Auslenkung der Atome der Reihe
σ_v	Wirkungsquerschnitt für Querergergieverletzung
φ	Azimutwinkel
θ	Winkel mit der Ebenenrichtung
$\langle \varphi^2 \rangle$	mittlerer quadratischer azimutaler Streuwinkel
χ	Winkel mit der Richtung der Atomreihe (Polarwinkel)
ψ_{kr}	kritischer Winkel für Querergergieerhaltung ($l=0$)

Literaturverzeichnis

- /1/ J. Lindhard, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 34
Nr. 14 (1965)
- /2/ D. D. Armstrong, W. M. Gibson, H. E. Wegner, Rad.
Effects 9 (1971) 241
- /3/ I. Zhukova, G. Iferov, A. F. Tulinov, V. Chumanov,
Proceedings of the III. All-Union Conference on Physics
of Interaction of Charged Particles with Single Crystals
Moscow, 1972 p. 155
- /4/ V. Lottner, Dissertation, LMU München (1974)
- /5/ H. A. Neumann, O. W. B. Schult, Atomkernenergie
8 (1963) 61
- /6/ G. A. Bennett, R. B. Wilson, J. Sci. Instrum.
43 (1966) 669
- /7/ T. K. Ghosh, F. J. P. Clarke, Brit. J. Appl. Phys.
12 (1961) 44
- /8/ W. E. Elkington, G. Thomas, J. Washburn, J. Am.
Ceram. Soc. 46 7 (1963) 307
- /9/ V. V. Skvortsov, I. P. Bogdanovskaya, JETP Letters
11 (1970) 1
- /10/ Chr. Lehmann, G. Leibfried, Z. Physik 172 (1963) 465
- /11/ B. R. Appleton, C. Erginsoy, W. M. Gibson, Phys. Rev.
161 (1967) 330
- /12/ C. Varelas, R. Sizmann, Rad. Effects 16 (1972) 211
- /13/ International Tables for X-ray Crystallography, pub.
for the Intern. Union of Crystallography, Kynoch Press,
Birmingham, England 1962
- /14/ J. H. Barret, Phys. Rev. 3B (1971) 1527
- /15/ D. V. Morgan, D. Van Vliet, Rad. Effects 8 (1971) 51

- /16/ E. Bonderup, H. Esbensen, J. U. Andersen, H. E. Schiøtt, Rad. Effects 12 (1972) 261
- /17/ M. R. Altmann, L. C. Feldman, W. M. Gibson, Rad. Effects 18 (1973) 171
- /18/ D. Van Vliet, On the Angular Dispersion of Channelled Ion Beams, Harwell-Report AERE-R 6395 (1970)
- /19/ J. A. Davies, J. Denhartog, J. L. Whitton, Phys. Rev. 165 (1968) 345
- /20/ H. S. Carslaw, J. C. Jaeger, "Conduction of Heat in Solids", Oxford, Clarendon Press 1959
- /21/ G. Foti, F. Grasso, R. Quattrocchi, E. Rimini, Phys. Rev. 3B (1971) 2169
- /22/ F. Grasso in: "Channelling - Theory, Observation and Application", Ed. D. V. Morgan, John Wiley and Sons, London 1973
- /23/ S. U. Campisano, F. Grasso, E. Rimini, Rad. Effects 9 (1971) 153
- /24/ K. Morita, Rad. Effects 14 (1971) 195
- /25/ V. V. Beloshitsky, M. A. Kumakhov, V. A. Muralev, Rad. Effects 13 (1972) 9
- /26/ J. C. Jaeger, Phil. Mag. 32 7 (1941) 324
- /27/ D. Young, The Numerical Solution of Elliptic and Parabolic Partial Differential Equations, Chap. 15 in "Modern Mathematics for the Engineer", ed. by E. F. Beckenbach, McGraw-Hill Book Co., New York 1956
- /28/ J. Crank, "The Mathematics of Diffusion", Oxford, Clarendon Press 1956, Chap. 10, p. 186
- /29/ N. R. Eyres, D. R. Hartree, J. Ingham, R. Jackson, R. J. Sarjant, J. B. Wagstaff, Phil. Trans. Roy. Soc. A 240 (1946) 1
- /30/ P. H. Price, M. R. Slack, Brit. J. Appl. Phys. 3 3 (1952) 379

- /31/ M. T. Robinson, Tables of Classical Scattering Integrals for the Bohr, Born-Maier and Thomas-Fermi Potentials, ORNL-3493 (1963)
- /32/ R. Burlisch, J. Stoer, Num. Math. 9 (1967) 271
- /33/ W. Romberg, Det Kong. Norske Videnskabers Selskab Forhandlinger 28 7 (1955)
- /34/ P. G. Shewmon, "Diffusion in Solids", McGraw-Hill Book Co., New York 1963
- /35/ A. N. Lowan, Duke Math. J. 1 (1935) 94

Anhang: Computerprogramm

START BEN+VM MV0314

U712AK LFD33 U712 LFDTT

IBM-RECHNER 370/158 BEIM KULTUSMINISTERIUM STEHT AUCH UNSEREN BENUTZERN ZUR VERFUEGUNG

FRAGEN SIE HERRN STREITWIESER (VGL. RUNDSCHK. 3/74)

ENDE BEN+VM

UPDATEI,VSPEICHER,SEC,L60,MBCD

KREIERT: VSPEICHER(C001.CC)

UPDATEI,STD67SCH,SEQ,U11C,U11C,P

KREIERT: STD67SCH(C001.CC)

DEINS.,U712.STREU,LFD

EINGESCHL.: STREU(C001.CC) BKZ: L712

DEINS.,U712.LRPHIOB,LFD

EINGESCHL.: LRPHIOB(C001.CC) BKZ: U712

DEIBAK 1,LRZOPA,LFD

START PS6BIBTRANS (12.02)

ENDE PS6BIBTRANS (12.02) 0.16

GUEBERSETZE, SPRACHE=ALG6C,QUELLE=STREU

START PS6ALGOLCOMP (31.02)

MENTAGEOBJEKT STOMP WURDE ERZEUGT

ANFANG PROTCOLL

000010 'BEGIN'

000020 'COMMENT' WINKELVERTEILUNG IN DER QUEREBENE ..

000030 'REAL' E,E1,E,K1,K2,A,D,C1,E,DICKE,DICKEQ,PHI,S,P,I,PO,LS,PC,PCQ,ACS,FKT,

000040 ARSC,PSI,RCC,PI,LS,X,LCIER,PHI,PHI2,Y,EM,ZEIT,IC,,-MINS,XC,LC,IC1, ..

000050 'REAL' PSIG,ECW,PHIL,SG,SUN,PHIV,KMITTEL,V,VG,DIFF,S REUPK,PEHS,PHIX ..

000060 'REAL' KO,EL,ELC,CQ,E12,Z1,Z2,PHIABS,PARA,ZDMITTEL ..

000070 'REAL' DICQ,E11C,DRA C,P,ION,DIEFN ..

000080 'REAL' PHIQ,EGMB,PHIRE,PH,GEI,PHIQND ..

000090 'REAL' PHICNS,PHICNS,K,YMA,EHFB1 ..

000100 'INTEGER' IP,CZ,T1,T'AY,E,I,J,ZA,UZ,M,N,TV,NL,IP,TK,TK1, ..

000110 'INTEGER' I1,M2,N2,IND,IPAXI,INDCK,IEB,JEB,TREFF,INDP,IU ..

000120 'INTEGER' ZEB,ZEA,PH,IEF,INIE,TIE,INIE,STRIE,STRIEF ..

000130 'INTEGER' TM,IMAX,IC,TE,,'A',Z,AHZ1,AHZP ..

000140 'BOOLEAN' HLI,BLLI,BPE,PEI ..

000150 'ARRAY' VTSS(70,359,1..5)..

000160 'ARRAY' TV(70,359)..

000170 'ARRAY' VTSS,VSP(70,359)..

000180 'ARRAY' PHIC,PHIQ,IND,PHIT,I ..

000190 'ARRAY' NEN(70,359)..

000200 'ARRAY' ZLC(359)..

000210 'INTEGER' 'ARRAY' DICKEQ(70,359)..

000220 'INTEGER' 'ARRAY' XZLC(359)..

000230 'BOOLEAN' 'ARRAY' BE(70,4)..

000240 'REAL' 'PROCEDURE' CHPT(Y),, 'CODE' ..

000250 'REAL' 'PROCEDURE' KAX(X),, 'CODE' ..

```

000260 'PROCEDURE'SHEET(N,F,H);'CODE';
000270 'PROCEDURE'FIGURE(A,B,C,N);'CODE';
000280 'PROCEDURE'FRAME;'CODE';
000290 'PROCEDURE'SCALE(X1,Z2,XLOG,Y1,Y2,YLOG);'CODE';
000300 'PROCEDURE'CURVE(K1,Z2,X,Y,TYPE);'CODE';
000310 'PROCEDURE'SIZE(Z);'CODE';
000320 'PROCEDURE'MOVETO(X,Y);'CODE';
000330 'PROCEDURE'MARK(SYMBOL);'CODE';
000340 'PROCEDURE'MOVECT(U,V);'CODE';
000350 'PROCEDURE'SUCHE(FELD,ENT,IMAX,INDEX);
000360 'VALUE'WERT,IMAX; 'INTEGER'IMAX,INDEX;
000370 'REAL'WERT; 'ARRAY'FELD;
000380 'BEGIN' 'INTEGER'INDEX1;
000390 INDEX:=0;
000400 TEST:='IF'IMAX-INDEX'EQUAL'1'THEN'GOTO'P;
000410 INDEX1:=(IMAX+INDEX)/2;
000420 'IF'FELD(INDEX1)'GT'WERT'THEN'INDEX:=INDEX1
000430 'ELSE'IMAX:=INDEX1;
000440 'GOTO'TEST;
000450 W:='END' 'SUCHE';
000460 READ(EH,H,EHBI);
000470 READ(CICKEL,TMAX,RCR,Z1,Z2,TMAX);
000480 INPCT(15,'(3ZD,1F6,0.3C,10B,ZD.10D,10B,D.2D)');N2,P,IG,ECK,EM);
000490 E:=E1*10;
000500 V:=1+8*SQRT(2*E+1,601864*-1,/(4*1,66053*-24));
000510 C2:=3;
000520 K:=3,14159265;K1:=140/K;K2:=K/2;
000530 D:=2,10;D1:=D/2;
000540 E1:=4,8022*-10;FLC:=EL=EL*+H/(1,6018*-12);
000550 F1:=2*Z1*Z2*ELU/D;EL2:=E1/2;
000560 A:=0,8853*0,5291508/SQRT(CBRT(Z1*Z1)+CBRT(Z2*Z2));
000570 C0:=D/SQRT(K);
000580 PARA:=C0*A*A;
000590 T1:=TMAX/2;DPO:=D1/T1;
000600 PSI:=PSIG/K1;
000610 V1:=V* SIN(PSI);
000620 'BEGIN'
000630 'REAL' 'ARRAY'LR,IN,PHI,IN2;
000640 'ARRAY'LS,L;
000650 'ARRAY'PHIN;
000660 'ARRAY'PHI;
000670 ABSCH:=L/N2;
000680 SUCH(EH,IN,RCR,Z2,INDEX);
000690 'FOR' I:=1 'STEP' 1 'UNTIL' TMAX 'DO'
000700 'BEGIN' READ(PHIC);
000710 PHIABS:=PHIC;
000720 'IF' PHIABS<0 'THEN' PHIABS:=ABS(PHIABS);
000730 'IF' PHIABS>90 'THEN' PHIABS:=PHIABS-90;
000740 'IF' PHIABS>45 'THEN' PHIABS:=90-PHIABS;
000750 CICKC:=CICKEL*TAH(FSI)*COS(PHIABS/K1)/D;
000760 CICKC:=ENTIER(CICKC);
000770 CICKCL:=0+CICKC/TAH(FSI)*COS(PHIABS/K1);
000780 T1:=1;T2:=0;
000790 'TITLE'=(C1,JEFF=0);
000800 'TITLE'=(C1,JEFF=0);
000810 FENS:=0;PHIQAN:=0;
000820 PHIC:=0;PHIN:=0;
000830 'TITLE'=(C1,JEFF=0);
000840 INMF:=TME,FC,PHICE;
000850 PHICD:=PHIQD:=0;
000860 'TITLE'=(C1,JEFF=0);
000870 'TITLE'=(C1,JEFF=0);
000880 'TITLE'=(C1,JEFF=0);

```

```

000880 ZEA.=2.,
000890 'FOR' I.=1'STEP'1'UNTIL'4'DO'DICKEQQ(/I/).=ENTIER(DICKEQ*I/5),
000900 DICKEQQ(/5/).=DICKEQ.,
000910 'FOR' I.=1'C'STEP'1'UNTIL'359'DO'VTV(/I/).=PHIQ(/I/).=INH(/I/).=RWIT(/I/).=C.,
000920 'FOR' I.=1'C'STEP'1'UNTIL'359'DO'VTS5(/I/).=PHIQN[1].=INH[1].=VSP[1].=C.,
000930 'FOR' I.=1'STEP'1'UNTIL'200'DO'REB(/I/).=C.,
000940 'FOR' I.=1'C'STEP'1'UNTIL'359'DO'
000950 'BEGIN' 'FOR' J.=1'STEP'1'UNTIL'5'DO'
000960 'BEGIN'
000970 VT(/I,J/).=C., VTS(/I,J/).=0.,
000980 'END'.,
000990 'END'.,
001000 'BEGIN'
001010 'INTEGER' 'ARRAY' TVT, ABFC., DICKEQ.,
001020 'ARRAY' PHQ, CPHI, ZE, 1., SICKIG(),
001030 'FOR' I.=1'STEP'1'UNTIL'DICKEQ'DO' TVT[I].=ABFC[I].=-.,
001040S OUTPUT(6,1,1,1,ENERGIE IN MEV,5B,1EQUER,5B,1DICKE IN ANGST,1,3B,
001050S PHIQ IN GRAD,1,7B,1MAX,TEILCHENZAML,5B,1PSI(GRAD,1,1),
001060S 5B,1HALBEELLENZAML,1,1,1),
001070S OUTPUT(6,1,1,1,D,1,16,1,2D,3D,2B,54D,D,11B,2ZD,2C,13B,52D,16B,C,2D,
001080S 1QB,2ZD,1,1,1,EN,EGQ,DICKEQ,PHIQ,1MAX,PSIG,DICKEQ),
001090S OUTPUT(6,1,1,1,1,1),
001100S 'COMMENT' '*****',
001110S 'FOR' IP.=1+1'STEP'1'UNTIL'11'DO'
001120S 'BEGIN' IP1.=IP.,
001130S NACHSCHUSS..PHIS.=PHIQ./FC.=BPO*IP1.,
001140S 'IF' ABS(PHIS)'GREATER'180'THEN'PHIS.=PHIS-360*SIGN(PHIS),
001150S 'IF' ABS(PHIS)'LESS'90'THEN'US.=+1.0'ELSE'LS.=-1.0.,
001160S ZE.=1.,M.=1.,BU1.='FALSE',
001170S EINHZ.,30.=FC.,BOC.=ABS(RC),
001180S BL1.=BOC'GREATER'ABSCH.,
001190S 'IF' BL1'THEN'
001200S 'BEGIN'
001210S CPHI.=16C*(1-1/SGT(1+PARA/(BOC*BOC)))/EQW.,
001220S RM.=BOC,
001230S 'GOTO' ABL.,
001240S 'END'STREU ODER NICHTSTREU-IMPULSNAEHERUNG.,
STREU..LS.=BOC.,
001250S 'IF' LS'LESS'1/(INDC/)'THEN'
001260S 'BEGIN' TV.=TV+1.,TVT[ZE].=TVT[ZE]*1.,
001270S ZEH.=ZE-1.,
001280S BL1.='TRUE', PHIL.=PHIS.,
001290S 'IF' PHIL'LESS'0'THEN'PHIL.=360+PHIL.,
001300S 'GOTO' HUEG.,
001310S 'END',
001320S
001330S SUCHE(L,LS,N2,IND),
001340S 'IF' LS'EQUAL'L/(IND/)'THEN'
001350S 'BEGIN'DPHI.=PHI(/IND/),
001360S RM.=RM*IND,
001370S 'GOTO' ABL.,
001380S 'END',
001390S 'IF' LS'GREATER'L/(IND/)'THEN'DPHI.=(PHI(/IND/)+PHI(/IND+1/))/2
001400S 'ELSE'DPHI.=(PHI(/IND/)+PHI(/IND-1/))/2.,
001410S RM.=RM*IND,
001420S ABL.. 'IF' BO=0'THEN' SG.=+1'ELSE' SG.=SIGN(BO),
001430S 'IF' ZE>ZEA'THEN'
001440S 'BEGIN'
001450S PHIV.=PHIS., 'IF' PHIV'LESS'0'THEN'PHIV.=360+PHIV.,
001460S PHIV.=ENTIER(PHIV),
001470S 'IF' PHIV=260'THEN'PHIV.=0.,
001480S INH(/PHIV/).=INH(/PHIV/)+1.,
001490S PHIQ(PHIV).=PHIQ(PHIV)+CPHI*(PHI/(K1*K1))

```

```

001500 PHM(ZE),=PHIV.,DPHMEJ.,=SG*DPHI/K1.,
001510 RMITTEL.=RMITTEL+RM;
001520 RMIT(PHIV),=RMIT(PHIV)+RM;
001530 'END' ..
001540 PHIS.=PHIS-DPHI*SG.,
001550 PHI2.=ABS(PHIS),
001560 'IF'PHI2'>'180'THEN'
001570 PHIS:=PHIS-360*SIGN(PHIS);
001580 PI:=PC;
001590 'IF'ABS(PHIS)'EQUAL'90'THEN'GOTO'MB;
001600 'IF'ABS(PHIS)'LESS'90'THEN'US.=1.000'ELSE'US.=-1.0000;
001610 RICHSTRECK.Y:=(LS*DI+SIN(PHIS/K1)-PI)/COS(PHIS/K1),
001620 'IF'ABS(Y)'GREATER'0.1'THEN'
001630 PC.=PI+C*SIGN(Y)*COS(PHIS/K1)'ELSE'
001640 PC.=PI-C*US*SIN(PHIS/K1);
001650 I3:=ZE.=ZE+1;
001660 PHIL.=PHIS.,
001670 'IF'PHIL'<'0'THEN'PHIL.=360+PHIL.,
001680 UMWEG..
001690 GZ.=ENTIER(PHIL),
001700 'IF' GZ'EQUAL'360'THEN'GZ.=0.,
001710 'IF'ALL'THEN'GOTO'VERLT.,
001720 VTS(GZ,1),=VTS(GZ,M)+1.,
001730 'IF'ZE'NOTGREATER'DICKEQEM'THEN'GOTO'EINHZ.,
001740 VT(GZ,M),=VT(GZ,M)+1.,
001750 '.,.=+1.,
001760 'IF'PH'GREATER'5'THEN'GOTO'SCHLEIFE'ELSE'GOTO'EINHZ.,
001770 SCHLEIFE.,TZ.=TZ+1.,
001780 'FUR'I.=ZE+1'STEP'1'UNTIL'DICKEQ'DD'
001790 'BEGIN' PH.=PHM(I),
001800 BUE.=PH'LESS'EBH'OR'PH'GREATER'90-EBH'AND'PH'LESS'90+EBH)
001810 'OR'(PH'GREATER'180-EBH'AND'PH'LESS'180+EBH)
001820 'OR'(PH'GREATER'270-EBH'AND'PH'LESS'270+EBH) OR'PH'GREATER'360-EBH;
001830 'IF'BU' THEN'
001840 'BEGIN' PHIQEM.=PHIQEM+DPHMC(I),
001850 STRIE.=STRIE+1;TCI.=1;
001860 INE.=INE+1., 'END'
001870 'ELSE' 'BEGIN'PHIQM.=PHIQM+DPHMC(I),
001880 STRNIE.=STRNIE+1;TCM.=2;
001890 INNE.=INNE+1., 'END'.,
001900 'IF'I.=ZE+1'THEN'TMV.=TMV;
001910 'IF'TMV=TMV+PH'GOTO'END'ELSE'
001920 'BEGIN' 'IF'TMV=1'THEN'REGINTMV.=2;GOTO'EM; 'END'
001930 'ELSE'REGINTMV.=1;GOTO'NPS;'END';
001940 'END'IF'
001950 EMS:
001960 PHIGENS.=PHIQMS+PHIQEM*PHIQEM/INE;
001970 TIE.=TIE+1;PHIQEM.=C*INE.=0;GOTO'END;
001980 NPS:
001990 PHIQMS.=PHIQMS+PHIQM*PHIQM/INNE;
002000 TNIE.=TNIE+1;PHIQM.=C*INNE.=0;
002010 IEND;'END';
002020 'GOTO'ENTFCKL.,
002030 EPL..'IF'ZE>'ZEM'THEN'VIV(GZ),=VIV(GZ)+1.,
002040 'FUR'I.=ZE+1'STEP'1'UNTIL'ZEM'
002050 'BEGIN' PH.=PHM(I),
002060 BUE.=PH'LESS'EBH'OR'PH'GREATER'90-EBH'AND'PH'LESS'90+EBH)
002070 'OR'(PH'GREATER'180-EBH'AND'PH'LESS'180+EBH)
002080 'OR'(PH'GREATER'270-EBH'AND'PH'LESS'270+EBH) OR'PH'GREATER'360-EBH;
002090 'IF'BU' THEN'
002100 'BEGIN' PHIQEM.=PHIQEM+DPHMC(I),
002110 STRIE.=STRIE+1;TCI.=1;

```

```
021200 INE.=INE+1,, 'END'
021300 'ELSE' 'BEGIN' PHICM.=PHICNM+DPHMCIJ,,
021400 STRNIE.=STRNIE+1,, TCM.=2;
021500 INNE.=INNE+1,, 'END'..
021600 'IF' I=ZEA+1 'THEN' TMV.=TCM;
021700 'IF' TCMV=TCM 'THEN' 'GOTO' IVEND; 'ELSE'
021800 'BEGIN' 'IF' TCMV=1 'THEN' 'BEGIN' TCMV.=2; 'GOTO' EM; 'END'
021900 'ELSE' 'BEGIN' TCMV.=1; 'GOTO' NMV; 'END';
022000 'END' 'IF';
022100 EMV:
022200 PHICEM.=PHICEM+PHIQEM*PHIQEM/INE;
022300 TIE.=TIE+1; PHIQEM.=0; INE.=0; 'GOTO' IVEND;
022400 NMV:
022500 PHIQNM.=PHIQNM+PHIQM*PHIQM/INNE;
022600 TNIE.=TNIE+1; PHIQNM.=0; INNE.=0;
022700 IVEND: 'END' IV;
022800 ENDESCHL.. 'END' SCHLEIFE ..
022900 'COMMENT' ****
023000 OUTPUT(6, ('///', 'TEILCHENZAH: '), 52C, 10B,
023100 ('VERLUSTE: ', '52C'), TZ, TV)..
023200 OUTPUT(6, ('///', 'RMIN(CR=)'), C, 10D), RMIN(/INDCR/))..
023300 'COMMENT' ****
023400 'FOR' I.=0 'STEP' 1 'UNTIL' 'CICKEQ' 'DO'
023500 'BEGIN'
023600 'FOR' J.=0 'STEP' 1 'UNTIL' 'I' 'DO'
023700 SUM.=SUM+TVTCMJ..
023800 ABF(IJ)=TVAX-SUM..
023900 'END' ..
024000 OUTPUT(6, ('///'))..
024100 'FOR' I.=0 'STEP' 1 'UNTIL' 'CICKEQ' 'DO'
024200 'BEGIN'
024300 'FOR' J.=1 'STEP' 1 'UNTIL' 'I+9' 'DO'
024400 'BEGIN'
024500 'IF' I*GREATER(I, INEQ) 'THEN' 'GOTO' ENDMARKE4..
024600 OUTPUT(6, ('47C, 3B'), ABFLM))..
024700 'END' ..
024800 OUTPUT(6, ('/'))..
024900 ENDMARKE4.. 'END' ..
025000 'COMMENT' ****
025100 'FOR' I.= 0 'STEP' 1 'UNTIL' 45 'DO' ZDEIJ.=D/CDS( I /K1)..
025200 'FOR' I.= 45 'STEP' 1 'UNTIL' 90 'DO' ZDEIJ.=D/CDS(( 90-I)/K1)..
025300 'FOR' I.= 91 'STEP' 1 'UNTIL' 135 'DO' ZDEIJ.=D/CDS(( I-90)/K1)..
025400 'FOR' I.= 136 'STEP' 1 'UNTIL' 180 'DO' ZDEIJ.=D/CDS((180-I)/K1)..
025500 'FOR' I.= 181 'STEP' 1 'UNTIL' 225 'DO' ZDEIJ.=D/CDS(( I-180)/K1)..
025600 'FOR' I.= 226 'STEP' 1 'UNTIL' 270 'DO' ZDEIJ.=D/CDS((270-I)/K1)..
025700 'FOR' I.= 271 'STEP' 1 'UNTIL' 315 'DO' ZDEIJ.=D/CDS(( I-270)/K1)..
025800 'FOR' I.= 316 'STEP' 1 'UNTIL' 359 'DO' ZDEIJ.=D/CDS((360-I)/K1)..
025900 'COMMENT' ****
026000 OUTPUT(6, ('///'))..
026100 'FOR' I.=0 'STEP' 1 'UNTIL' 359 'DO'
026200 'BEGIN'
026300 STRFLPRO.=STRFLPR+INH(/I)..
026400 ZDHITTEL.=ZDHITTEL+ZDEIJ*INH(IJ)..
026500 'END'..
026600 'FOR' J.=0 'STEP' 1 'UNTIL' 359 'DO'
026700 'BEGIN' (PH.=J)
026800 PH.=PH*LESS'90'-EBHB' 'AND' 'PH' 'LESS' '90'+EBHB)
026900 'OR' (PH*GREATER'180'-EBHB' 'AND' 'PH' 'LESS' '180'+EBHB)
027000 'OR' (PH*GREATER'17'-EBHB' 'AND' 'PH' 'LESS' '270'+EBHB) 'OR' 'PH' 'GREATER' '360'-EBHB;
027100 'OR' (PH*GREATER'45'-EBHB' 'AND' 'PH' 'LESS' '45'+EBHB)
027200 'OR' (PH*GREATER'135'-EBHB' 'AND' 'PH' 'LESS' '135'+EBHB)
027300 'OR' (PH*GREATER'225'-EBHB' 'AND' 'PH' 'LESS' '225'+EBHB);
```

```

002740 'OR'(PH'GREATER'315-EHB1)'AND'(PH'LESS'315+EBH1);
002750 'IF'BU1'THEN'BEGIN'IF'INH1J=0'THEN'GOTO'AUSW;
002760 ANZ.=ANZ+1;PHIQED.=PHIQED+PHIQ(J)/INH1J;'GOTO'AUSW;'END';
002770 'IF'BU1'THEN'BEGIN'IF'INH1J=0'THEN'GOTO'AUSW;
002780 ANZ1.=ANZ1+1;PHIQAN.=PHIQAN+PHIQ(J)/INH1J;'END';
002790 'ELSE'BEGIN'IF'INH1J=0'THEN'GOTO'AUSW;
002800 ANZ.=ANZ+1;PHIQED.=PHIQED+PHIQ(J)/INH1J;'END';
002810 AUSW:'END';
002820 ZDMITTEL.=ZDMITTEL/STREUPRO.;
002830 'IF'ANZ'GREATER'0'THEN'PHIQED.=PHIQED/ANZ'ELSE'PHIQED.=0;'IF'ANZ1'GREATER'0'THEN'
002840 'IF'ANZ1'GREATER'0'THEN'PHIQED.=PHIQED/ANZ1'ELSE'PHIQED.=0;
002850 D11C.=PHIQAN/(2*ZDMITTEL);D11Q.=PHIQED/(2*ZDMITTEL);DRAND.=PHIQED/(2*ZDMITTEL);
002860 PHIQEM.=PHIQEM/TIE;
002870 PHIQNM.=PHIQNM/TNIE;
002880 DIFF.=PHIQEM/(2*ZDMITTEL);
002890 DIFFN.=PHIQNM/(2*ZDMITTEL);
002900 OUTPUT(6,'(///,ZC,10C,10B,3(10ZD,5B))',ZDMITTEL,STREUPRO,TIE,TNIE);
002910 PRINT(STRIE,STRNIE);
002920 OUTPUT(6,'(///,4(ZC,15C,5B))',PHIQEM,DIFF,PHIQNM,DIFFN);
002930 OUTPUT(6,'(///,6(ZC,10C,5B))',PHIQED,D11Q,PHIQAN,D11Q,PHIQED,DRAND);
002940 'FOR'I.=0'STEP'1'UNTIL'355'DO'
002950 'BEGIN'
002960 VTS5(//).=(VTS(/I,4/)+VTS(/I,5/))/(DICKEQ-DICKEQ/(3/)).
002970 VTS(/I,4/).=VTS(/I,4/)/(DICKEQ/(4/)-DICKEQ/(3/)).
002980 VTS(/I,5/).=VTS(/I,5/)/(DICKEQ-DICKEQ/(4/)).
002990 'END';
003000 'FOR'I.=0'STEP'1'UNTIL'355'DO'VSPLI].=VSPCI]+VTS5(I);
003010 'FOR'I.=0'STEP'1'UNTIL'355'DO'
003020 'BEGIN'FOR'J.=I'STEP'1'UNTIL'I+6'DO'
003030 'BEGIN'IF'J'GREATER'355'THEN'GOTO'SPEICHER;
003040 OUTPUT(20,'(6ZD,2C,B)',VSPLJ);
003050 'END';
003060 OUTPUT(20,'(//)');
003070 SPEICHER:'END';
003080 YMA.=MAX(VSP);
003090 FAKT.=YMA/120;
003100 OUTPUT(6,'(///,2(4ZC,30,10B),///)',FAKT,YMA);
003110 'COMMENT'*****
003120 OUTPUT(6,'(*)');
003130 'FOR'J.=0'STEP'1'UNTIL'355'DO'
003140 OUTPUT(6,'(//,(')',2ZC,'(')'),10B,6(6ZC,20,'B'))',J,VTV(/J/),
003150 VTS(/J,4/),VTS(/J,5/),VSP(/J/),VT(/J,4/),VT(/J,5/));
003160 'COMMENT'*****
003170 OUTPUT(6,'(*)');
003180 OUTPUT(6,'(//,4B,13(')'),9(')'),('I')');
003190 'FOR'J.=0'STEP'1'UNTIL'355'DO'
003200 'BEGIN'
003210 ZA.=ENTIER(VSP(J)/FAKT);
003220 OUTPUT(6,'(//,2ZC,'(-)')',J);
003230 'FOR'I.=0'STEP'1'UNTIL'ZA'DO'
003240 OUTPUT(6,'(//,(')'),('I')');
003250 'END'PLECT.;
003260 'END' DICKE;
003270 PLOTTER:
003280 SHEET(1,275,330);
003290 PLOT(40,219,5,100,250);
003300 FRAME;
003310 'FOR'I.=0'STEP'1'UNTIL'355'DO'XZ[I],I;
003320 SCALE(0,35,200,0,25,0,25);

```

1138*U712AK-TAB-SCHNID

LFC33S SEITE

7

20.03.74

LRZ-MUENCHEN

TR440

003360 CURVE(0,359,XZ,VSP,11);
003370 PHIOENDE:'END' PHIO;
003380 'END' IN2;
003390 PROGRAMMENDE..
003400 'END' PROGRAMM;
ENDE PROTOKOLL

ENDE PS&ALGOLCOMP (31.02) 4.56
PS&MONTIERE

START PS&MONTSEGM (17.07)

ENDE PS&MONTSEGM (17.07) 4.35
PS&STARTE,DATEI=15-LR,PHIOB'67-STC67SCH'20-VSPEICHER'30-U712AKVSP,
DUMP=A-NEST,DATEN=/ FREMDSTRING LAENGER ALS 160 ZEICHEN

START STOPP

Lebenslauf

Geboren am 31. Januar 1941 in Nürnberg

Volksschule in Altenstadt/Iller und Waldhäuser im Bayer.Wald
1947-1952

Humanistisches Gymnasium in Schweiklberg b. Vilshofen und
Weiden i.d.Opf.

1952-1961

Abitur 1961

Studium an der Technischen Hochschule München im Fach Physik B
1961-1967

Abschluß als Diplom-Physiker 1967

Seit 1967 bei der Sektion Physik der Universität München tätig
Anfertigung der vorliegenden Dissertation unter Anleitung von
Prof.R.Sizmann

Page 10

Received of the Hon. Secy. of the Navy

the sum of \$100.00 for the purpose of

the purchase of

the sum of \$100.00 for the purpose of

the purchase of

the sum of \$100.00 for the purpose of

the purchase of

the sum of \$100.00 for the purpose of

the purchase of

the sum of \$100.00 for the purpose of

the sum of \$100.00 for the purpose of

the sum of \$100.00 for the purpose of

the sum of \$100.00 for the purpose of

